



Universidad
Carlos III de Madrid

TESIS DOCTORAL

MÉTODOS ESPECTRALES APLICADOS A PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE CARGA EN DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

Autor:

Idulfo Arrocha Rodríguez

Directores:

Manuel Carretero Cerrajero y
Manuel Kindelan Segura

Instituto Gregorio Millán Barbany
Grupo de Modelización, Simulación Numérica y
Matemática Industrial.

Leganés, julio de 2013

TESIS DOCTORAL

MÉTODOS ESPECTRALES APLICADOS A PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE CARGA EN DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

Autor: Idulfo Arrocha Rodríguez

Directores: Manuel Carretero Cerrajero y Manuel Kindelan Segura

Firma del tribunal calificador:

Firma

Presidente:

Vocal:

Secretario:

Calificación:

Leganés, de de

*A Yajaira, Humberto y ...
a todos aquellos que nunca
han dejado de creer en mi.*

Agradecimientos

En primer lugar, quiero darle mi más profundo agradecimiento a mis directores de tesis Manuel Carretero Cerrajero y Manuel Kindelan Segura, por su guía y dedicación durante la elaboración de esta tesis. En segundo lugar, quiero agradecer a la Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación de Panamá por brindarme los medios económicos que me han permitido realizar los estudios de doctorado. Agradezco, muy especialmente, al profesor Ruben Rosales, por toda la ayuda y su colaboración durante la elaboración de esta investigación. Tengo que agradecer también al Grupo de Modelización, Simulación Numérica y Matemática Industrial y al Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química por los medios materiales y humanos de los que he disfrutado durante estos cinco años. A los compañeros del doctorado por su desinteresada ayuda y por los conocimientos que compartieron conmigo. Finalmente, quiero agradecer a los miembros del tribunal que han accedido a formar parte de éste.

Resumen

El objetivo de esta tesis doctoral es proponer métodos numéricos eficientes para la resolución de modelos que describen la dinámica de los portadores en dos tipos de dispositivos semiconductores: una estructura de múltiples pozos cuánticos (MQW) y un transistor de efecto de campo (MESFET).

Para estudiar los procesos dinámicos en un dispositivo de MQW, consideramos un modelo hidrodinámico bidimensional propuesto por Sherman, Abrarov y Sipe [1], el cual describe la dinámica de las cargas producida mediante inyección óptica. Dicho modelo está descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales hiperbólicas acopladas y fuertemente no lineales. Para resolver numéricamente este modelo, usamos métodos espectrales, los cuales han demostrado una alta eficacia en la resolución de este tipo de ecuaciones diferenciales que involucran fenómenos ondulatorios.

El esquema numérico que hemos desarrollado es estable, robusto y permite calcular soluciones para tiempos largos. De hecho, la solución del modelo hidrodinámico bidimensional nos permite observar que la dinámica de las cargas tiene un comportamiento predominantemente unidimensional. Este hecho nos ha motivado a formular una versión unidimensional del modelo, en principio más sencilla, pero que conserva las propiedades físicas esenciales del modelo original. Con este modelo unidimensional hemos reproducido, fielmente, los resultados obtenidos por el modelo bidimensional completo. Además, para tiempos largos, hemos derivado una solución asintótica que concuerda con los resultados numéricos.

Por otro lado, hemos extendido el modelo analizado incluyendo los efectos de la aplicación de un campo magnético y lo hemos resuelto numéricamente con nuestro algoritmo.

Para estudiar la dinámica de las cargas en un dispositivo MESFET, consideramos un modelo de Drift-Diffusion (DD) [43, 74]. La geometría y las condiciones de contorno discontinuas, típicas de estos dispositivos, hacen muy difícil su solución numérica usando métodos numéricos tradicionales. Una al-

ternativa eficiente para la solución de este tipo de problemas es el método sin malla de Funciones de Base Radial (RBF). El método RBF global posee precisión espectral, pero tiene la desventaja de que el sistema lineal resultante se convierte en mal condicionado cuando se incrementa el número de nodos o disminuye el parámetro de forma. El esquema numérico que proponemos en esta tesis se basa en el uso de aproximaciones con RBF locales en lugar de las globales. El método RBF local carece de la precisión espectral del método RBF global, pero permite eludir los problemas de mal condicionamiento. Los resultados obtenidos usando RBF locales son muy acordes con los que se obtienen con el método global.

Abstract

The aim of this Ph.D. thesis is to propose efficient numerical methods for solving the models that describe the dynamics of the carriers in two kinds of semiconductor devices: a multiple quantum wells structure (MQW) and a field effect transistor (MESFET).

To study the dynamic processes in a MQW device, we consider a 2D hydrodynamic model proposed by Sherman, Abrarov and Sipe [1], which describes the dynamics of the charges produced by optical injection. The model consist of nonlinear hyperbolic partial differential equations strongly coupled. To numerically solve this model, we use spectral methods, which have shown a high efficiency in the solution of this type of differential equations involving wave phenomena.

The numerical scheme based in spectral methods is stable and robust. Furthermore, it can be used to compute the solutions for long times, and it can be extended to analyze the effect of applying a magnetic field. The solution of the 2D hydrodynamic model allows us to observe that the dynamics of charges have a predominantly unidimensional behavior. This fact motivates us to formulate a one-dimensional version of it, which is simple enough, but contains the main physics of the original one. With this 1D model we reproduce, closely, the results obtained from the solution of the 2D model. For long times, we derive an asymptotic solution which is in close agreement with the numerical results.

To study the dynamics of the charges in a MESFET device, we consider the Drift-Diffusion Model (DD) [43, 74]. The discontinuous boundary conditions and the complex geometry typical of these devices, makes very challenging its numerical solution using traditional numerical methods. An efficient alternative for the solution of this type of problems is the use of Radial Basis Functions (RBF) meshless method. The global RBF method has spectral accuracy but has the disadvantage that the resulting linear system becomes ill-conditioned when the number of nodes increases or the shape

parameter decreases. The numerical scheme that we propose in this thesis is based on using the local RBF approximation instead of the global version. The local RBF method lacks the spectral accuracy of the global RBF method, but avoids the ill-conditioning problem. The results obtained using local RBF are very consistent with those obtained with the global method.

Índice

Agradecimientos	VII
Resumen	IX
Abstract	XI
1. Introducción	1
1.1. Contenido de la Tesis.	4
2. Conceptos generales.	7
2.1. Introducción.	7
2.1.1. Organización del capítulo.	7
2.2. Problemas de transporte de carga en dispositivos semiconduc- tores.	8
2.2.1. Estructuras de múltiples pozos cuánticos (MQW).	9
2.2.2. El transistor de efecto de campo (MESFET).	12
2.2.3. Modelos para el transporte electrónico en dispositivos semiconductores.	13
2.3. Métodos numéricos para la resolución de modelos hidrodiná- micos.	14
2.3.1. Métodos espectrales.	14
2.3.2. Métodos sin malla.	21
2.3.3. Métodos para la integración de la variable temporal.	32
3. Métodos espectrales aplicados a la dinámica de corrientes 2D inyectadas ópticamente.	37
3.1. Introducción.	37
3.1.1. Organización del capítulo.	39

3.2. Ecuaciones del modelo.	40
3.2.1. Ecuaciones adimensionales.	41
3.3. Esquemas numéricos.	43
3.3.1. Cálculo del campo eléctrico mediante Transformada Rápida de Fourier (FFT).	43
3.3.2. Derivadas espectrales.	48
3.3.3. Esquemas numéricos para la integración de la variable temporal.	50
3.4. Resultados numéricos.	54
3.4.1. Análisis del modelo sin fricción.	58
3.5. Conclusiones.	61
4. Efectos del campo magnético en la dinámica de corrientes inyectadas ópticamente.	67
4.1. Introducción.	67
4.1.1. Organización del capítulo.	68
4.2. Ecuaciones del modelo con campo magnético.	69
4.2.1. Ecuaciones adimensionales.	70
4.3. Esquemas numéricos.	71
4.4. Análisis y resultados.	71
4.4.1. Caso solamente con la fuerza de Lorentz.	71
4.4.2. Caso sin fricción.	75
4.4.3. Modelo completo.	78
4.5. Análisis del desplazamiento medio de la distribución de la den- sidad de electrones.	81
4.6. Conclusiones.	84
5. Modelo 1D de la dinámica de corrientes inyectadas ópticamente.	89
5.1. Introducción.	89
5.1.1. Organización del capítulo.	90
5.2. Derivación del modelo.	90
5.2.1. Adimensionalización.	92
5.3. Modelo 1D en coordenadas comóviles.	93
5.4. Resolución numérica del modelo 1D.	95
5.4.1. Discretización espacial.	97
5.4.2. Derivación espectral y convolución usando FFT.	98

5.4.3. Algoritmo para la evolución temporal.	100
5.5. Resultados numéricos.	101
5.5.1. Resultados del modelo 1D completo.	101
5.5.2. Comparación de los resultados entre los modelos 1D y 2D.	105
5.5.3. Solución para tiempos largos.	106
5.6. Conclusiones.	108
6. Método de partículas aplicado al modelo 1D.	109
6.1. Introducción.	109
6.1.1. Organización del capítulo.	110
6.2. Formulación.	110
6.3. Método de partículas.	111
6.4. Análisis de los resultados.	115
6.5. Conclusiones.	119
7. Método RBF aplicado a la dinámica de cargas en dispositivos MESFET.	123
7.1. Introducción.	123
7.1.1. Organización del capítulo.	124
7.2. Formulación del modelo.	125
7.2.1. Ecuaciones adimensionales.	125
7.3. Esquemas numéricos.	127
7.3.1. RBF globales aplicadas al modelo de Drift-Diffusion . .	128
7.3.2. RBF locales aplicadas al modelo de Drift-Diffusion . .	130
7.4. Resultados numéricos	133
7.4.1. Resultados usando RBF globales.	135
7.4.2. Resultados usando RBF locales.	136
7.5. Conclusiones.	136
8. Conclusiones generales.	139
A. Derivación del campo eléctrico 1D con una aproximación de ondas planas.	143
B. Convolución exacta.	147
C. Cálculo de valores característicos	

para el modelo de Drift-Diffusion.	149
Bibliografía	151

Índice de figuras

2.1. Estructura de un dispositivo de pozos cuánticos (QW).	9
2.2. Esquema de la inyección óptica de portadores.	10
2.3. Esquema de la inyección óptica de un dispositivo de MQW.	11
2.4. Estructura de un dispositivo MESFET.	12
2.5. Comparación del error de la derivada de la función $f(x) = e^{-x^2/2}$, calculada usando derivación espectral con FFT (rojo) y diferencias finitas de segundo orden (azul). El eje vertical de esta figura está en escala logarítmica.	19
2.6. (Izquierda) aproximación de la derivada de la función $f(x) = -xe^{-x^2/2}$ usando derivación espectral sobre nodos equiespaciados y (derecha), usando derivación espectral de Chebyshev.	21
3.1. Esquema de la inyección óptica de corriente en el dispositivo de múltiple pozos cuánticos (MQW)[1].	38
3.2. Gráficas de $k_1(x, y) = \frac{x}{(x^2+y^2)^{3/2}}$ (izquierda) y $k_2(x, y) = \frac{y}{(x^2+y^2)^{3/2}}$ (derecha).	45
3.3. Distribución espacial de $E_{h_1} = N_h * k_1$ (izquierda) y $E_{h_2} = N_h * k_2$ (derecha).	48
3.4. Distribución espacial de $\frac{\partial N_e(x, y, 0)}{\partial x}$ (izquierda) y $\frac{\partial N_e(x, y, 0)}{\partial y}$ (derecha) usando la diferenciación espectral de Chebyshev via FFT.	50
3.5. Condiciones iniciales del sistema (3.30)-(3.32), $N_e(x, y, 0) = qe^{-(x^2+y^2)/2}$, $u(x, y, 0) = 0.032$, $v(x, y, 0) = 0$, con $q = 1$	55
3.6. $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), en $t = 80$ fs.	56
3.7. $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 1$ en $t = 1.3$ ps.	57
3.8. $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 1$ en $t = 1.5$ ps.	58

3.9. $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 4$ en $t = 1.5$ ps.	59
3.10. $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 16$ en $t = 2.0$ ps.	60
3.11. Cambio en la distribución de la densidad de electrones $N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0)$ en $t = 80$ fs (columna izquierda) y en $t = 1.5$ ps (columna derecha), con $q = 1$ (primera fila) y $q = 16$ (segunda fila). Esta figura es comparable con la figura 2 de [1].	61
3.12. Desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$, definido en (3.51), con $q = 4$; $\tau_{eh} = 50$ fs, $q = 4$; $\tau_{eh} = 150$ fs y $q = 16$; $\tau_{eh} = 150$ fs. Esta figura es comparable con la figura 4 de [1].	62
3.13. $(N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0))$ (arriba), v (abajo izquierda) y v (abajo derecha) en $t = 4.0$ ps	63
3.14. $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ en $t = 6.27$ ps con velocidad inicial $0.1u(x, y, 0)$. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].	63
3.15. $u(x, y, t)$ en $t = 6.27$ ps con velocidad inicial $0.1u(x, y, 0)$. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].	64
3.16. $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ (primera fila) y $u(x, y, t)$ (segunda fila) para $b_\infty = 4$ (columna izquierda) y $b_\infty = 1/16$ (columna derecha) en $t = 0.45$ ps. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].	64
3.17. Gráfica de $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ en $t = 14$ ps con velocidad inicial $0.01u(x, y, 0)$	65
3.18. $u(x, y, t)$ en $t = 14$ ps con velocidad inicial $0.01u(x, y, 0)$	65
3.19. Desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$ definido en (3.51) para el caso $\tau_{eh} = 1.5$ ps ($b_\infty = 0.9333$).	66
4.1. (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^4$ ms ⁻¹ en $t = 4.82$ ps.	73
4.2. (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^6$ ms ⁻¹ en $t = 1.20$ ps.	74

4.3. (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 3$ T, $u_0 = 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 1.20$ ps.	77
4.4. (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$ en $t = 1.20$ ps.	78
4.5. (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$ en $t = 1.82$ ps.	79
4.6. (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 0.18$ ps.	80
4.7. (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 20$ T, $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 0.18$ ps.	81
4.8. Evolución temporal del valor máximo de la primera componente de la velocidad local, u , cuando la velocidad inicial es $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$, para $H = 20$ T.	82
4.9. (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 20$ T, $u_0 = 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 1.0$ ps.	83
4.10. Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.14).	84
4.11. Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.14).	85
4.12. Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.21).	86
4.13. Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.21).	87
4.14. Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.3).	87
4.15. Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.3).	88
5.1. La función Mollifier	96
5.2. Cambio relativo en la densidad de distribución de electrones $N_e(x, t) - N_h(x)$ (en cm $^{-2}$) para los tiempos $t = 80$ fs (azul) y $t = 1.5$ ps (rojo). Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$	101
5.3. Cambio relativo en la densidad de distribución de electrones $N_e(x, t) - N_h(x)$ (en cm $^{-2}$) como una función del espacio x y el tiempo t . Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$	102

5.4.	Velocidad $u(x, t)$ como una función del espacio x . De arriba hacia abajo las curvas corresponden a los tiempos $t = 0; 0.016; 0.036; 0.08; 0.2; 0.5$ ps. Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$.	103
5.5.	Desplazamiento medio de la mancha $\langle x(t) \rangle$ (línea continua) y desplazamiento en la aproximación rígida de la mancha $\langle x_{rsa} \rangle$ (líneas discontinuas), como una función del tiempo. Para $q = 16$, $\tau_{eh} = 150$ fs (rojo); $q = 4$, $\tau_{eh} = 150$ fs (azul) y $q = 4$, $\tau_{eh} = 50$ fs (negro).	104
5.6.	Evolución en el tiempo de los límites del soporte del dominio $a(t)$, $b(t)$.	105
5.7.	Solución numérica del sistema (5.10)-(5.11) para el caso $N_h = 0$, en tiempos 80 fs (línea continua), 1.5 ps (línea discontinua), 10 ps (línea punteada-discontinua) y 80 ps (línea de puntos). Izquierda: densidad de electrones adimensional ρ . Derecha: velocidad adimensional u .	106
5.8.	Densidad de electrones adimensional ρ (izquierda) y velocidad adimensional u (derecha) para los tiempos $t = 50$ ps (línea continua), $t = 70$ ps (línea discontinua), $t = 90$ ps (línea punteada-discontinua) para el caso $N_h = 0$. Curva azul: Solución numerica. Curva roja: Solución asintótica.	107
6.1.	Comparación de las soluciones de la ecuación de la distribución de la densidad de electrones: (línea continua) método espectral y (línea discontinua) método de partículas.	114
6.2.	Comparación de las soluciones de la ecuación de la distribución de la densidad de electrones: (línea continua) solución asintótica (5.47), (línea discontinua) métodos espectral y (línea punteada) método de partículas.	115
6.3.	Comparación de la solución asintótica de la convolución (5.46) (línea discontinua) y la obtenida con la fórmula (5.33) (línea continua).	116
6.4.	Solución analítica (línea sólida punteada) y numérica mediante el método de partículas (línea de ceros) para: (izquierda) u y (derecha) ρ en $t = 0.1$.	117
6.5.	Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha) para $t = 0.1, 0.48$ y 0.8 con $\alpha = 1.6$, cuando no se tiene en cuenta el término de la convolución.	118

6.6. Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha) para $t = 0.45, 0.8$ y 5.0 con $\alpha = 1.6$ e incluyendo el término de la convolución.	119
6.7. Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha), para tiempos $t = 0.1, 0.48$ y 1.13 , a partir de un perfil de velocidad inicial gaussiano, con $\alpha = 0.6$, cuando no se tiene en cuenta el término de la convolución.	120
6.8. Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha), para $t = 0.19, 0.94$ y 5.0 , a partir de un perfil de velocidad inicial gaussiano, con $\alpha = 0.6$ e incluyendo el término de la convolución.	121
6.9. Soluciones para tiempos largos ($t = 125$ unidades adimensionales) de: u (izquierda) y ρ (derecha), partiendo de una condición inicial de la velocidad con perfil gaussiano e incluyendo el término de la convolución.	121
7.1. Geometría del dispositivo MESFET simulado.	134
7.2. Condiciones iniciales de: (izquierda) distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la Densidad de los electrones n	135
7.3. (izquierda) Distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la densidad de los electrones n en $t = 0.1$ ps, usando RBFs globales	136
7.4. (izquierda) Distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la densidad de los electrones n , usando RBFs globales, cuando han alcanzado su estados estacionario.	137
7.5. (arriba) Distribución del potencial φ y (abajo) distribución de la densidad de los electrones n , usando RBF-FD locales.	138

Índice de Tablas

2.1. Funciones de Base Radial (RBF).	23
3.1. Constantes físicas del modelo.	42
3.2. Valores característicos para las variables adimensionales.	42
5.1. Parámetros dimensionales y constantes físicas para el modelo 1D [1].	92
7.1. Valores característicos usados en la adimensionalización del modelo de Drift-Diffusion.	126
7.2. Variables adimensionales del modelo de Drift-Diffusion.	126

Capítulo 1

Introducción

La investigación de la dinámica de las cargas y de los procesos eléctricos y físicos que ocurren en los materiales semiconductores es importante para el desarrollo y construcción de dispositivos semiconductores. Dichos dispositivos son sistemas estructurados cuyas propiedades eléctricas y ópticas están gobernadas por una amplia variedad de procesos dinámicos no lineales.

Aunque las características de los semiconductores son conocidas desde hace tiempo, el enfoque como sistemas dinámicos no lineales es bastante reciente [14, 17, 19]. A través del modelado y la simulación numérica de estos dispositivos es posible reproducir las complejas dinámicas que ocurren en los mismos. Sin embargo, la resolución numérica de los modelos requiere un esfuerzo computacional bastante exigente si se usan métodos numéricos tradicionales, tales como las diferencias finitas.

El objetivo de esta tesis es proponer métodos numéricos más eficientes para la resolución de modelos que describen las dinámicas de los portadores en dos tipos concretos de dispositivos semiconductores: una estructura de múltiples pozos cuánticos (MQW) y un transistor de efecto de campo (MESFET).

Los modelos que estudiamos en esta tesis pertenecen a una aproximación semi-clásica del transporte de carga de los portadores, con lo cual las ecuaciones que definen dichos modelos son de tipo hidrodinámico. Para la simulación de los procesos dinámicos en un dispositivo de MQW, estudiaremos un modelo hidrodinámico bidimensional propuesto por Sherman, Abrarov y Sipe [1], mientras que, para modelar la dinámica de las cargas en un dispositivo MESFET, usaremos el modelo de Drift-Diffusion (DD), el cual se puede derivar de la ecuación de Boltzmann [43, 74].

El modelo hidrodinámico propuesto por Sherman, Abrarov y Sipe es-

tá descrito por ecuaciones diferenciales en derivadas parciales hiperbólicas acopladas y fuertemente no lineales. Cuando se usan métodos numéricos tradicionales, como por ejemplo diferencias finitas, para resolver este tipo de ecuaciones diferenciales, el coste computacional es muy alto, pese a que el grado de precisión alcanzado no es muy elevado. Los mencionados autores han resuelto numéricamente su modelo usando una aproximación mediante una base finita del tipo Hermite-Gauss, y han obtenido resultados razonables para tiempos cortos. Sin embargo, para tiempos largos, los complejos patrones que se forman en las soluciones hacen que tal aproximación deje de ser eficiente.

En esta tesis investigamos y resolvemos numéricamente, las ecuaciones del modelo propuesto por Sherman *et al.* [1], mediante la aplicación de métodos espectrales, los cuales han demostrado tener una alta eficacia en la resolución de este tipo de ecuaciones, que involucran fenómenos ondulatorios [23, 38, 92].

Los métodos espectrales se basan en la aproximación de funciones mediante su expansión en términos de una determinada base. Por ejemplo, exponenciales complejas en el caso de una serie de Fourier. Desde que en 1965 Cooley y Tukey [27] propusieron el algoritmo de la Transformada Rápida de Fourier (FFT), los métodos espectrales de Fourier se han convertido en una poderosa herramienta para la solución de ecuaciones diferenciales, sobre todo por la precisión espectral que se obtiene en las soluciones numéricas y por el, relativamente, bajo coste computacional asociado.

Un aspecto clave a la hora de resolver el modelo hidrodinámico propuesto por Sherman *et al.* está vinculado a las integrales que definen el campo eléctrico. Estas integrales tienen integrandos constituidos por núcleos singulares que, además, decrecen muy lentamente en el infinito, lo cual hace muy difícil su computación numérica empleando métodos de cuadratura. Sin embargo, aprovechando las propiedades de la Transformada de Fourier y de la convolución de funciones, hemos calculado dichas integrales, logrando de esta manera una aproximación espectral de las mismas.

El problema de la integración temporal también es un aspecto importante a la hora de obtener la solución de las ecuaciones diferenciales hiperbólicas, como las que resolvemos en esta tesis, sobre todo porque la alta precisión obtenida con los métodos espectrales requiere también un método acorde en la variable temporal. Es por ello que hemos implementado un método semi-implícito que contempla la condición de estabilidad de las leyes de conservación, separando la parte lineal de la no lineal en las ecuaciones. Como consecuencia, hemos podido hacer tratable el tiempo de cómputo, ya que hemos podido tomar incrementos de tiempo mayores que los usados típicamente

en métodos explícitos.

El esquema numérico que usamos, basado en métodos espectrales, es muy robusto y nos ha permitido ampliar el modelo incluyendo los efectos de la aplicación de un campo magnético. Además, al resolver el modelo hidrodinámico bidimensional hemos observado que la dinámica de la distribución de los electrones sigue un patrón de comportamiento predominantemente unidimensional. Esta observación nos ha motivado a formular una aproximación mediante ondas planas con objeto de reproducir los resultados del modelo bidimensional, pero utilizando un modelo unidimensional que, aunque es más sencillo, conserva las propiedades físicas esenciales del modelo original. De hecho, con el modelo unidimensional hemos reproducido cualitativamente y con gran precisión cuantitativa los resultados obtenidos con el modelo completo. Además hemos podido expresar las integrales del modelo vinculadas al campo eléctrico en términos de la transformada de Hilbert. Gracias a ello hemos derivado la solución asintótica de las ecuaciones cuando el tiempo tiende a infinito y solamente se considera el efecto del campo eléctrico debido a los electrones.

Por otro lado, debido a la eficiencia y precisión de los algoritmos que hemos desarrollado, en esta tesis analizamos y resolvemos numéricamente por primera vez la aplicación de un campo magnético en un modelo de inyección óptica, siendo los trabajos recientes de Rao y Sipe en 2011 [66], las referencias teóricas más relevantes al respecto.

El segundo problema que abordamos en esta tesis es la resolución numérica del modelo de Drift-Diffusion (DD) para dispositivos MESFET. Aunque el uso de métodos numéricos para el estudio de este tipo de modelos se conoce desde hace tiempo, la geometría y las condiciones de contorno discontinuas típicas de estos dispositivos hacen muy compleja su resolución usando métodos tradicionales tales como los esquemas de diferencias finitas o de elementos finitos. Recientemente, los métodos sin malla han cobrado un gran auge en la resolución de dichos modelos. Tal es el caso del uso de las Funciones de Base Radial (RBF) globales [57, 63, 64], cuyas principales ventajas son la convergencia espectral con geometrías irregulares y distribución de nodos no equiespaciados, así como la facilidad de implementación en cualquier dimensión. Pero su principal desventaja, sin embargo, es que el sistema lineal resultante se hace mal condicionado cuando se aumenta el número de nodos o se disminuye el parámetro de forma. Para evitar estos problemas, en esta tesis proponemos una forma alternativa de resolución basada en la utilización de aproximaciones con RBF locales. Los resultados obtenidos usando RBF locales son muy acordes a los que se obtienen con el método global.

1.1. Contenido de la Tesis.

La presente tesis está organizada de la siguiente manera:

Al inicio de cada capítulo se incluye una breve introducción acerca de los conceptos y procesos que se desarrollan en el mismo. Al final incluimos las principales conclusiones.

El capítulo 2 hace una revisión de los conceptos generales necesarios para entender el contenido de la tesis y en particular describe los métodos numéricos que utilizamos en la misma.

En el capítulo 3 se resuelve el modelo hidrodinámico propuesto por Sherman, Abrarov y Sipe [1], para modelar las corrientes generadas en un dispositivo con múltiples pozos cuánticos mediante inyección óptica. Los esquemas numéricos que hemos utilizado para resolver el problema, están basados en métodos espectrales, que usamos para calcular tanto las derivadas espaciales como las integrales que definen el campo eléctrico. Para comprobar la eficacia de los métodos espectrales hacemos comparaciones con los resultados obtenidos en [1].

En el capítulo 4 analizamos por primera vez la influencia de un campo magnético en un modelo de inyección óptica. Para ello añadimos un término adicional (*la fuerza de Lorentz*) a la ecuación de la velocidad del modelo expuesto en el capítulo 3 y resolvemos numéricamente las ecuaciones mediante métodos espectrales. Dado que no hay resultados experimentales sobre la influencia de un campo magnético en la inyección óptica de dispositivos de pozos cuánticos, siendo la referencia más reciente el trabajo teórico de Rao y Sipe en 2011 [66], para calibrar que las soluciones numéricas obtenidas se ajustan a la física del dispositivo comprobamos que nuestro modelo reproduce cuantitativamente la frecuencia y el radio de ciclotrón que describen las partículas cargadas en presencia de un campo magnético perpendicular a la dirección de movimiento de dichas partículas.

En el capítulo 5 formulamos, mediante una aproximación de ondas planas, la versión unidimensional del modelo hidrodinámico resuelto en el capítulo 3. Comprobamos que esta aproximación reproduce los resultados obtenidos con el modelo bidimensional completo. Además resolvemos analíticamente el modelo de ondas planas cuando el tiempo tiende a infinito y solamente se considera el efecto del campo eléctrico debido a los electrones.

En el capítulo 6 resolvemos el modelo de ondas planas formulado en el capítulo 5 mediante un método de partículas. El objetivo es verificar que en ausencia del término de la convolución, se puede producir “wave breaking” en

la solución de las ecuaciones, mientras que con la inclusión de éste término se logra detener el desarrollo de dichas ondas de choque.

En el capítulo 7 resolvemos numéricamente el modelo de Drift-Diffusion para un dispositivo MESFET, utilizando métodos RBF globales y también mediante RBF-FD locales, haciendo una comparación de los resultados de ambos métodos.

El capítulo 8 contiene las conclusiones generales a las que hemos llegado en esta tesis.

El apéndice A contiene la derivación del campo eléctrico unidimensional para el modelo de ondas planas que formulamos en el capítulo 5.

El apéndice B contiene la deducción de la fórmula de la convolución exacta utilizada en la solución para tiempos largos que calculamos en el capítulo 5.

Finalmente el apéndice C contiene el cálculo de algunas variables físicas que se utilizan en la resolución numérica del modelo de Drift-Diffusion en el capítulo 7.

Capítulo 2

Conceptos generales.

2.1. Introducción.

Este capítulo pretende ofrecer un panorama general acerca de la simulación numérica de dispositivos semiconductores, centrándonos en la descripción de los dos dispositivos que estudiaremos y en los modelos usados para su simulación. Además, haremos una revisión de los conceptos generales de los métodos numéricos que utilizaremos para su resolución a lo largo de esta tesis.

2.1.1. Organización del capítulo.

En la sección 2.2 describimos las características básicas de los dispositivos semiconductores objeto de estudio en esta tesis y nos referimos brevemente a los modelos que describen los problemas de transporte de carga. En la sección 2.3 se explica detalladamente los métodos numéricos que usaremos para resolver problemas de transporte de carga en dispositivos de múltiples pozos cuánticos y MESFET. Se describen los métodos espectrales utilizados en los capítulos 3, 4 y 5 y los métodos sin malla aplicados en los capítulos 6 y 7. También se exponen en esta sección, los métodos para la integración de la variable temporal, que son utilizados en los capítulos 3 al 6.

2.2. Problemas de transporte de carga en dispositivos semiconductores.

Desde los inicios de la electrónica moderna, los dispositivos semiconductores han cobrado una gran relevancia, sobre todo por la amplia variedad de campos de aplicación. Desde componentes de ordenadores portátiles hasta partes de satélites de comunicación, hoy día es posible explotar las propiedades físicas que poseen los materiales semiconductores en la fabricación de una amplia variedad de dispositivos, dentro de los cuales los más conocidos son los transistores, diodos, triac, etc. El material comunmente usado en la fabricación de los dispositivos semiconductores es el Silicio (Si), debido a su abundancia en la naturaleza, sin embargo, también se usan materiales compuestos tales como el Arseniuro de Galio (GaAs) o el Arseniuro de Galio-Aluminio (AsGaAl), debido a sus características físicas y químicas. Por ejemplo, su baja masa efectiva comparada con la del Silicio le dan la ventaja de que los electrones se aceleran a mayor velocidad, lo cual los hace útiles y atractivos en aplicaciones de alta frecuencia como por ejemplo las redes de área local (WLAN) o los sistemas de posicionamiento global (GPS).

Dos hechos en la historia del desarrollo y construcción de los dispositivos semiconductores han sido relevantes:

- En primer lugar, las modernas técnicas de crecimiento [7, 29] han permitido la miniaturización de estos dispositivos a escalas nanométricas, así también como la construcción de estructuras compuestas por varias capas de diferentes materiales semiconductores llamadas heteroestructuras de baja dimensionalidad [71]. En estas estructuras los fenómenos físicos relevantes ocurren a niveles cuánticos.
- En segundo lugar, en 1969-1970 Esaki y Tsu [13] proponen la construcción de un tipo de estructuras cristalinas artificiales llamadas superredes. Este hecho dio un gran impulso no solo a la fabricación de otras estructuras microscópicas, como los pozos cuánticos, sino también cambió la forma en que se estudia la dinámica que ocurre en la superficie de los mismos.

En esta tesis estudiamos la dinámica de dos dispositivos semiconductores: un dispositivo de Múltiples Pozos Cuánticos (MQW) y un Transistor de Efecto de Campo Metal Semiconductor (MESFET). En esta sección describiremos las características básicas de cada uno, así como los modelos usados para la simulación de estos dispositivos.

2.2.1. Estructuras de múltiples pozos cuánticos (MQW).

Una estructura de pozos cuánticos (*Quantum Well* QW) es un tipo particular de heteroestructura de baja dimensionalidad [7, 29] compuesta por dos tipos diferentes de semiconductores en la que una delgada capa llamada pozo es rodeada por dos capas llamadas barreras [56, 65]. Esta capa, en la que tanto los electrones como los huecos están confinados es muy delgada (típicamente su ancho es de 10\AA). Existen estructuras mucho más complejas que constan de varias capas de pozos cuánticos conocidas como múltiples pozos cuánticos (MQW).

La mayor parte de las estructuras de MQW utilizan interfaces entre GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, donde x varía típicamente entre 0.1 y 0.4 [7] (figura 2.1). Los electrones y los huecos están confinados en las capas de GaAs debido a las barreras de potencial que encuentran en la interface GaAs-AlGaAs.

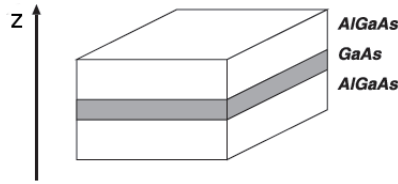


Figura 2.1: Estructura de un dispositivo de pozos cuánticos (QW).

2.2.1.1. Inyección óptica de portadores de carga en estructuras de MQW.

En este trabajo nos interesa la dinámica de las cargas en los dispositivos de MQW a partir de su inyección óptica, es por esto que en este apartado incluimos una descripción breve del proceso y destacamos algunos estudios recientes que se han realizado en este campo.

Cuando un semiconductor está en el equilibrio térmico, la tasa de recombinación de los portadores está siempre compensada por la de generación, manteniéndose constantes las concentraciones [25]. Sin embargo, no siempre se tienen situaciones de equilibrio, pues existen muchos procesos de generación de portadores distintos al térmico, como por ejemplo, los debidos a la excitación de portadores cuando el material se ilumina con radiación electromagnética. En estos casos, por cada fotón absorbido se rompe un enlace y se

crea un par electrón-hueco. También se puede crear un exceso de portadores sobre el valor de equilibrio cuando se ponen en contacto dos semiconductores de signo opuesto. A todos estos procesos que originan exceso de portadores sobre los valores de equilibrio se les denomina *procesos de inyección* [3] (figura 2.2). Es posible inyectar portadores usando otros métodos, dentro de los cuales el que nos interesa es la inyección óptica [54], que consiste en hacer incidir un haz de luz sobre un semiconductor. Si la energía del fotón de luz $E = \hbar\omega$ es mayor que la energía de la banda prohibida (“band gap”) E_g del semiconductor, donde \hbar es la constante de Planck y ω es la frecuencia óptica, el fotón es absorbido por el semiconductor y se genera un par electrón-hueco [82]. La excitación óptica aumenta la concentración de los portadores por encima de su equilibrio térmico.

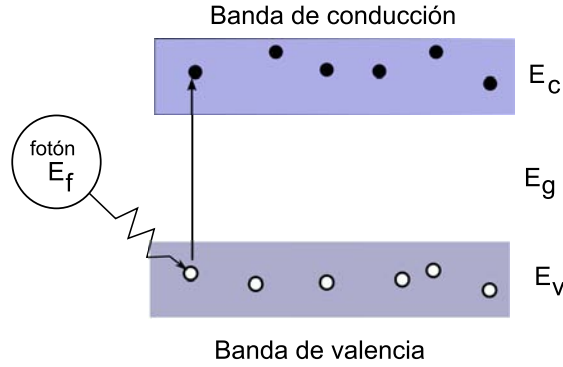


Figura 2.2: Esquema de la inyección óptica de portadores.

La inyección óptica de portadores en semiconductores y particularmente en heteroestructuras de semiconductores mediante secuencias de pulsos de láser óptico es objeto de estudio actualmente [4, 33, 44]. El interés por la inyección óptica se debe a que permite generar plasmas con una densidad de carga y una densidad de corriente que se controla de forma óptica. En efecto, se ha comprobado experimentalmente [31, 32, 80, 81], que es posible generar balísticamente una corriente en los portadores haciendo incidir dos haces de luz láser con frecuencias ω y 2ω , que satisfacen $2\hbar\omega > E_g > \hbar\omega$. En este esquema, la interferencia de los dos haces del láser es usada para excitar la corriente de los portadores. En particular, J. E. Sipe *et al.* [60] y M. J. Stevens *et al.* [80] prueban experimentalmente que es posible inyectar balísticamente una corriente en un dispositivo MQW de GaAs/AlGaAs (figura 2.3). Los dos pulsos ópticos se hacen incidir directamente sobre la superficie de la estructura provocando el movimiento de los portadores a lo largo de

la dirección $\hat{\mathbf{r}}$, que está en el plano del pozo cuántico (el plano $x - y$). El control de la densidad inicial de corriente se consigue mediante la interferencia cuántica de la transición de un fotón (frecuencia 2ω y fase $\phi_{2\omega}$) y de la transición de dos fotones (frecuencia ω y fase ϕ_ω), a través de la banda prohibida fundamental (“band gap”) \mathbf{E}_g . Cuando $\Delta\phi \equiv \phi_{2\omega} - 2\phi_\omega$ es no nulo, se rompe la simetría de la distribución inyectada en el espacio de momentos y se genera una corriente macroscópica con velocidad $U_0 = v_e |\sin \Delta\phi|$ en la dirección paralela a la superficie. La velocidad máxima v_e , de los electrones inyectados, es función de ω y \mathbf{E}_g y alcanza los 10^3 km/s para $2\hbar\omega - \mathbf{E}_g$ del orden de 100 meV [76]. Esta corriente inyectada genera una separación en los electrones y los huecos que origina fuerzas de Coulomb con elevada no uniformidad. La distribución de las densidades de los electrones y huecos y su correspondiente velocidad evolucionan en tiempo y espacio en un plano debido al confinamiento producido por las barreras formadas con las capas de AlGaAs.

Los estudios, tanto teóricos como experimentales, sobre la dinámica de los portadores en estructuras de baja dimensionalidad se han enfocado principalmente al transporte vertical en superredes y en otras estructuras donde el movimiento vertical es posible [14, 17, 19]. Dichos estudios han jugado un papel muy importante en la descripción de las complejas dinámicas no lineales que pueden ocurrir en estas estructuras semiconductoras. Sin embargo, en las investigaciones sobre la inyección óptica en las estructuras de MQW sólo se considera el transporte lateral ya que el correspondiente transporte vertical es probabilísticamente despreciable debido a que los pozos están suficientemente separados.

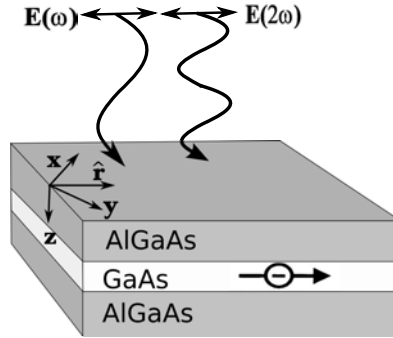


Figura 2.3: Esquema de la inyección óptica de un dispositivo de MQW.

Aún así, el análisis de la dinámica lateral de los portadores sigue siendo

muy complejo debido a la no linealidad de las ecuaciones de los modelos que describen dicha dinámica.

2.2.2. El transistor de efecto de campo (MESFET).

El segundo tipo de dispositivo, que estudiamos en el capítulo 7, es un transistor de efecto de campo, específicamente un MESFET.

Un transistor de efecto de campo (*Field-Effect Transistor* FET) es básicamente un transistor controlado mediante la aplicación de un voltaje. La mayoría de los transistores de efecto de campo están fabricados con Silicio, por las excelentes propiedades de este material y por su abundancia en la naturaleza. Sin embargo, el GaAs y otros materiales compuestos presentan ciertas ventajas sobre el Silicio, como por ejemplo la mayor movilidad de sus electrones. El transistor de efecto campo más importante es el transistor de efecto de campo metal semiconductor (*Metal Semiconductor Field Effect Transistor* MESFET) [21]. El MESFET de GaAs (Figura 2.4) consta de un sustrato semiaislante o ligeramente dopado tipo *P*. Encima de este semiconductor hay otra capa conductora tipo *N* (canal) en la que se conectan tres terminales: los contactos óhmicos de fuente *S* y drenador *D* y un contacto Schottky que actúa como puerta *G*. Entre fuente y drenador se hace circular una corriente mediante una tensión aplicada entre estos terminales. Esta corriente se puede controlar a su vez mediante una tensión aplicada al terminal de puerta. El control de esta corriente se realiza gracias a la variación de la zona de carga espacial que aparece en el canal debajo de la puerta [72].

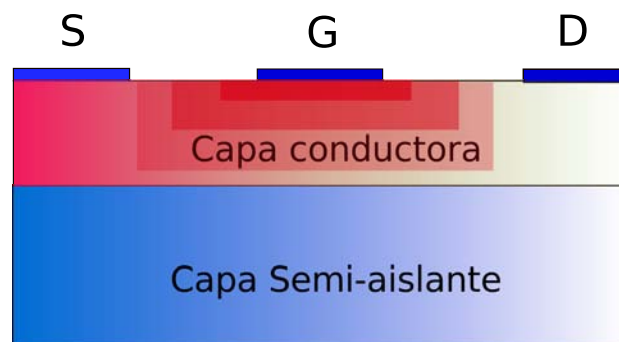


Figura 2.4: Estructura de un dispositivo MESFET.

2.2.3. Modelos para el transporte electrónico en dispositivos semiconductores.

Los modelos matemáticos que estudiamos en esta tesis tienen como objetivo describir los procesos dinámicos de los portadores de corriente en los dos dispositivos semiconductores descritos anteriormente, que por lo general tienen naturaleza no lineal. La teoría del transporte eléctrico en semiconductores describe cómo los portadores de carga interactúan bajo la influencia de campos eléctricos y magnéticos.

Hay varios niveles en los que el transporte en semiconductores se puede modelar, dependiendo de la estructura específica bajo consideración [15, 16, 17, 71]. El estudio del transporte electrónico en dispositivos semiconductores exige la aplicación de la mecánica cuántica. Asimismo la complejidad de la física puesta en juego hace necesario el uso de códigos de tipo Monte Carlo que resuelven, de manera estocástica, la ecuación de transporte de Boltzmann y la ecuación de Schrödinger, tomando en cuenta los diferentes efectos cuánticos para explicar el comportamiento de dispositivos con dimensiones nanométricas. Sin embargo, existen otras aproximaciones de tipo semi-clásicas [85] tales como los modelos hidrodinámicos derivados de la ecuación de Boltzmann o los modelos hidrodinámicos clásicos en los que la distribución de las densidades de los portadores son considerados como un gas compresible y que por lo tanto se puede modelar usando las ecuaciones de la mecánica de fluidos, pero usando la información que brinda el modelo cuántico [18, 40].

Los modelos hidrodinámicos clásicos se han convertido en una herramienta estandar de la industria de la simulación [40], que incorporan importantes fenómenos de *electrones calientes* en los dispositivos semiconductores submicrométricos. Los modelos hidrodinámicos tratan la propagación de los electrones y/o de los huecos en un dispositivo semiconductor como el flujo de un fluido compresible cargado. De esta manera, los modelos hidrodinámicos son equivalentes a las ecuaciones de la dinámica electrón-gas.

La simulación hidrodinámica, usando no solo la densidad de los portadores sino también el momento promedio y la energía como variables dinámicas, ha sido satisfactoriamente aplicada incluso en complejas estructuras tridimensionales y geometrías realistas.

El modelo hidrodinámico para las corrientes inyectadas ópticamente en los dispositivos de MQW, que estudiaremos a lo largo de los capítulos 3 al 6, pertenece a este tipo de modelos, donde se toman conceptos de la mecánica cuántica, pero la nube de electrones se considera que sigue los procesos propios de un fluido.

Por otra parte, para modelar la dinámica de las cargas en un dispositivo MESFET, utilizaremos el modelo de *Drift-Diffusion* (DD), el cual es el más simple que se puede derivar a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann [43]. Durante muchos años, este modelo ha sido la columna vertebral de la simulación de dispositivos semiconductores. En dicho modelo, la densidad de corriente es fenomenológicamente expresada por dos componentes: la corriente de deriva (*drift*) o de arrastre, conducida por el campo eléctrico que acelera los electrones y los huecos, y la corriente de difusión (*diffusion*), debida al gradiente de la densidad de los portadores.

Las ecuaciones que describen cada uno de estos modelos se expondrán en los correspondientes capítulos.

2.3. Métodos numéricos para la resolución de modelos hidrodinámicos.

En esta sección describiremos los métodos que usaremos para resolver numéricamente los modelos hidrodinámicos estudiados en esta tesis. Para la solución del modelo hidrodinámico para las corrientes generadas mediante inyección óptica en dispositivos MQW, usamos métodos espectrales (capítulos 3 al 5) y los métodos de partículas (capítulo 6). Mientras que para el modelo de Drift-Diffusion, que resolvemos en el capítulo 7, usaremos métodos de funciones de base radial (RBF).

2.3.1. Métodos espectrales.

Los métodos espectrales fueron propuestos inicialmente en 1944 por Bli-nova [23], como una herramienta para simulaciones a gran escala de dinámica de fluidos. Sin embargo su uso se abandonó y no fue hasta la década de los 70 cuando Orszag [42] y Eliason [23] los hicieron resurgir. Con el trabajo de Gottlieb y Orszag [42], en 1977, se presentaron los primeros fundamentos matemáticos, después de los cuales el uso de los métodos espectrales alcanzó otras áreas de aplicación en los años 80 y entraron en la *corriente principal* de la computación científica en los años 90.

Una de las principales contribuciones al desarrollo de los métodos espectrales fue el algoritmo de la Transformada Rápida de Fourier (FFT) ideado por Cooley y Tuckey [27] en 1965, el cual despertó el interés por su aplicación a la solución de ecuaciones diferenciales [46]. Los métodos espectrales demostraron ser particularmente útiles en estudios numéricos de la dinámica

de fluidos. Se utilizaron códigos espectrales en estudios de turbulencia, modelaje global del comportamiento climático y en la dinámica de los océanos e incluso en mecánica cuántica. Hoy en día son una de las herramientas más potentes, a la par que los métodos de diferencias finitas y de los elementos finitos, para la solución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDPs) [93].

Una de las razones por las que se usan los métodos espectrales para la solución numérica de EDPs es su mayor grado de precisión con respecto a otros métodos, sobre todo en problemas que realmente requieren mucha precisión, tales como problemas de aerodinámica, inestabilidades hidrodinámicas y transición a turbulencias. Esta alta precisión se llama *convergencia exponencial* [20, 93]. Si aproximamos la derivada de una función suave con diferencias finitas de orden p , sobre una discretización con N puntos equiespaciados, al aumentar N el error del esquema de diferencias finitas decrece como $O(N^{-p})$. Pero en los métodos espectrales la velocidad de convergencia es mucho más elevada. En particular, si la función es infinitamente diferenciable, el error en el método espectral será $O(N^{-\alpha})$, para todo α , y si la función es analítica, la convergencia es aún más rápida $O(c^N)$ ($0 < c < 1$). Esto es lo que se denomina *convergencia exponencial* [84].

Por otro lado, los métodos espectrales son útiles no solamente por su elevada precisión, sino también porque minimizan el uso de memoria debido a la economía del número de grados de libertad en comparación con, por ejemplo, los métodos de diferencias finitas.

El concepto básico para todo método espectral es aproximar la solución de una ecuación diferencial como una suma finita (truncada) en términos de una base ortogonal de funciones infinitamente diferenciables [49]. La idea es asumir que la incógnita $u(x)$ pueden ser aproximada mediante una suma de N funciones base $\phi_k(x)$ tal que [20]

$$u(x) \approx u_N(x) = \sum_{k=1}^N a_k \phi_k(x) \quad (2.1)$$

Diferentes funciones base dan lugar a diferentes aproximaciones espectrales. Si $\phi_k(x) = e^{ikx}$, las aproximaciones espectrales se denominan de Fourier. Si $\phi_k(x) = T_k(x)$ (Polinomios de Chebyshev), la aproximación se llama de Chebyshev [38]. Existen también otras funciones base que producen otros tipos de aproximaciones espectrales, como por ejemplo $\phi_k(x) = \mathcal{L}_k(x)$ (Polinomios de Laguerre) y $\phi_k(x) = L_k(x)$ (Polinomios de Legendre) [75]. El reto consiste en encontrar los coeficientes a_k correspondientes a la aproximación u_N .

2.3.1.1. Métodos espectrales de Fourier.

Para problemas periódicos [38], usamos una expansión en una base finita de funciones de Fourier, que son las exponenciales complejas, esto es $\phi_k(x) = e^{ikx}$, $k = 1, \dots, N$, $x \in \mathbb{R}$. De esta manera la expansión en esta base tiene la forma

$$u_N(x) = \sum_{k=1}^N a_k e^{ikx} \quad (2.2)$$

El método espectral de Fourier consiste en encontrar los coeficientes a_k correspondientes a la expansión de la función u_N en esta base. Dichos coeficientes se calculan fácilmente aprovechando la ortogonalidad de las funciones base. Esto es

$$a_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ikx} u_N(x) dx \quad (2.3)$$

Los coeficientes a_k se denominan coeficientes de Fourier de $u_N(x)$.

En un método espectral, la aproximación se mejora incrementando el número de funciones de la base, de manera que si tomamos ahora un conjunto infinito $\{\phi_k(x)\}_{k=-\infty}^{\infty}$ de funciones base, la expansión de una función $u(x)$, $x \in \mathbb{R}$ será:

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{u}_k e^{ikx} \quad (2.4)$$

donde

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ikx} u(x) dx, \quad (2.5)$$

son los coeficientes de Fourier de la función u y k es el número de onda.

2.3.1.2. La transformada discreta de Fourier.

En la práctica, cuando se resuelve numéricamente una ecuación diferencial empleando métodos espectrales, lo que se tiene es un número finito de valores de una función definida sobre un intervalo acotado, por lo que es necesario truncar la serie infinita. Así que la discretización de los nodos se toma periódica. En muchos problemas de computación científica el fenómeno de interés no está relacionado con las fronteras (como los problemas que queremos abordar en los capítulos 3 a 5, por ejemplo), en tales casos, es útil usar una malla periódica, aunque el fenómeno físico no lo sea [84].

A la serie truncada se le conoce como la transformada discreta de Fourier (DFT). Así, nuestra red periódica será un subconjunto del intervalo $[0, 2\pi]$ (es

posible extender la longitud de este intervalo a otro diferente a 2π , mediante el uso de un apropiado factor de escala).

Dado un conjunto de N pares de puntos (x_j, v_j) , correspondientes a la función $v(x)$, con $v_j = v(x_j)$, tal que $x_j \in [0, 2\pi]$, la fórmula para la transformada discreta de Fourier (DFT)[78, 84] de $v(x)$ es:

$$\hat{v}_k = h \sum_{j=1}^N e^{-ikx_j} v_j, \quad k = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad h = \frac{2\pi}{N}, \quad (2.6)$$

Esta es la versión discreta de la fórmula (2.5).

Mientras que la transformada discreta de Fourier inversa está dada por

$$v_j = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-N/2+1}^{N/2} e^{ikx_j} \hat{v}_k \quad j = 1, \dots, N \quad (2.7)$$

que es equivalente a su versión infinita (2.4), donde N tiene que ser un número par [84] para garantizar la validez de las fórmulas (2.6) y (2.7), de modo que el número de onda k toma sólo valores enteros.

2.3.1.3. La transformada rápida de Fourier.

Aunque la fórmula para la DFT nos permite calcular la transformada de Fourier de un conjunto de N datos de una función, la evaluación directa requiere cerca de $O(N^2)$ operaciones aritméticas [67]. Cada operación aritmética implica una multiplicación y una adición, lo cual es una considerable cantidad cuando se trata de algoritmos numéricos. Esta complejidad, sin embargo, puede reducirse significativamente desarrollando algoritmos eficientes para la DFT, en este caso a través de la Transformada Rápida de Fourier (FFT) [27]. Si N es una potencia de 2, entonces la FFT permite calcular la DFT de una manera eficiente, reduciendo el número de operaciones a $O(N \log_2 N)$ [67, 84].

Una definición para la FFT, y su inversa (IFFT), es la siguiente [53]

$$\hat{v}_k = \sum_{j=1}^N v_j W_N^{(j-1)(k-1)}, \quad (2.8)$$

$$v_j = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \hat{v}(k) W_N^{-(j-1)(k-1)}, \quad (2.9)$$

donde $W_N = e^{-i\frac{2\pi}{N}}$ y $N = 2^n$, siendo n un entero positivo [22].

2.3.1.4. Derivada espectral y convolución.

Las fórmulas para calcular la derivada espectral de una función (usando la FFT) y la convolución de dos funciones, se derivan de las propiedades de la transformada de Fourier. Así, dadas dos funciones reales $f(x)$ y $g(x)$ continuas y suaves a trozos, tal que $f, f', g \in L^2(\mathbb{R})$, la transformada de Fourier (\mathcal{F}) de la derivada de f y la transformada de la convolución de f con g son, respectivamente [37]

$$\mathcal{F}\{f'\}(k) = ik\hat{f}(k) \quad (2.10)$$

y

$$\mathcal{F}\{f * g\} = \hat{f}(k)\hat{g}(k) \quad (2.11)$$

donde $\mathcal{F}\{f(x)\} = \hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x) dx$.

Como $\hat{f} \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \pm\infty$, entonces, si \mathcal{F} es la transformada rápida de Fourier, se tiene que

$$\mathcal{F}\{f(x)\} \approx \mathcal{F}\{f(x)\} \quad \text{y} \quad (2.12)$$

$$\mathcal{F}\{g(x)\} \approx \mathcal{F}\{g(x)\} \quad (2.13)$$

Con lo cual la derivada espectral de f y la convolución de f con g en términos de su correspondiente transformada inversa de Fourier (\mathcal{F}^{-1}) son

$$\frac{df}{dx} = \Re [\mathcal{F}^{-1}\{ik\mathcal{F}(f)\}] \quad (2.14)$$

y

$$f(x) * g(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g)\} \quad (2.15)$$

donde \Re indica la parte real.

Las fórmulas (2.14) y (2.15) las usaremos en los capítulos 3, 4 y 5 para calcular las derivadas y la convolución que aparecen en las ecuaciones diferenciales que se resuelven.

A manera de ejemplo, en la figura 2.5 se puede apreciar la convergencia exponencial del error (rojo) de la derivada de la función $f(x) = e^{-x^2/2}$, calculada mediante diferenciación espectral con FFT (fórmula (2.14)) y también la convergencia lineal del error que se obtiene usando diferencias finitas de segundo orden (azul). Nótese que, para una cantidad de puntos relativamente pequeña ($N = 40$), el error que se obtiene al usar la derivación espectral es del orden de $O(10^{-13})$.

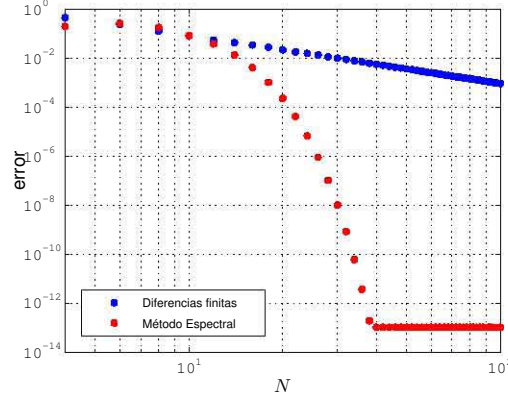


Figura 2.5: Comparación del error de la derivada de la función $f(x) = e^{-x^2/2}$, calculada usando derivación espectral con FFT (rojo) y diferencias finitas de segundo orden (azul). El eje vertical de esta figura está en escala logarítmica.

2.3.1.5. Derivación espectral de Chebyshev.

La aproximación de la derivada usando la fórmula (2.14) mediante FFT es muy precisa si las funciones son periódicas o convergen rápidamente a cero en los extremos del intervalo donde se han discretizado sus valores. En el caso de que no ocurra esto, existen varias alternativas, una de ellas es utilizar como base para la expansión los polinomios de Chebyshev y aprovechar las propiedades que los relacionan con las series de Fourier. Por ejemplo el hecho de que los coeficientes de una expansión usando polinomios de Chebyshev son los mismos coeficientes de la expansión en series de cosenos de Fourier [20].

Los polinomios de Chebyshev se definen en términos de cosenos como [20, 84]

$$T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta) \quad (2.16)$$

Dada una función $f(x)$, una expansión en polinomios de Chebyshev viene dada por:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x) \quad (2.17)$$

haciendo $x = \cos \theta$ y usando la definición (2.16) obtenemos que:

$$f(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta) \quad (2.18)$$

que no es más que la expansión de la función f en una serie de Fourier de cosenos. El resultado anterior implica dos cosas: en primer lugar que al evaluar una función f no periódica en $f(\cos(k\theta))$ la convertimos en periódica y segundo, como consecuencia de lo anterior, podemos usar la FFT para calcular sus coeficientes. Sin embargo, al igual que en la transformada discreta de Fourier, dado que en la práctica lo que se tiene es un conjunto finito de valores de una función, la versión truncada de la aproximación de la función f sobre polinomios de Chebyshev es

$$f_N(\cos \theta) = \sum_{n=0}^N a_n \cos(n\theta) \quad (2.19)$$

y la derivada de esta aproximación es

$$\frac{df_N}{dx} = \frac{df_N}{d\theta} \frac{d\theta}{dx} = \frac{\sum_{n=0}^N n a_n \sin(n\theta)}{\sqrt{1-x^2}} \quad (2.20)$$

ya que $\theta = \arccos(x)$.

Luego el algoritmo de la derivación espectral de Chebyshev vía FFT consiste en:

1. Discretizar las funciones sobre nodos Chebyshev (no equiespaciados) [84], esto es

$$x_j = \cos(j\pi/N), \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (2.21)$$

de modo que $x_j \in [-1, 1]$.

2. Utilizar la FFT igual que en la fórmula (2.14) para calcular el numerador de la fórmula (2.20) como sigue:

$$-\sum_{n=0}^N n a_n \sin(n\theta) = \Re \left[\mathcal{F}^{-1} \{ i k \mathcal{F}(\widetilde{f}(x)) \} \right] \quad k = -N+1, \dots, N \quad (2.22)$$

donde \widetilde{f} es la función $f_N(x)$ extendida periódicamente, con periodo 2π .

Por lo tanto

$$\frac{df_N(x_j)}{dx} = -\frac{\Re \left[\mathcal{F}^{-1} \{ i k \mathcal{F}(\widetilde{f}_j) \} \right]}{\sqrt{1-x_j^2}} \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (2.23)$$

Para calcular las derivadas de f en los puntos $x_0 = -1$ y $x_N = 1$, se tienen fórmulas especiales que se pueden obtener de (2.20) aplicando la regla de L'Hôpital. Estas fórmulas son

$$\frac{df_N(x_0)}{dx} = \sum_{j=0}^N j^2 \mathcal{F}(\tilde{f}_j) \quad \text{y} \quad \frac{df_N(x_N)}{dx} = \sum_{j=0}^N (-1)^{j+1} j^2 \mathcal{F}(\tilde{f}_j) \quad (2.24)$$

En la figura 2.6 se aprecia, del lado izquierdo, la aparición de oscilaciones

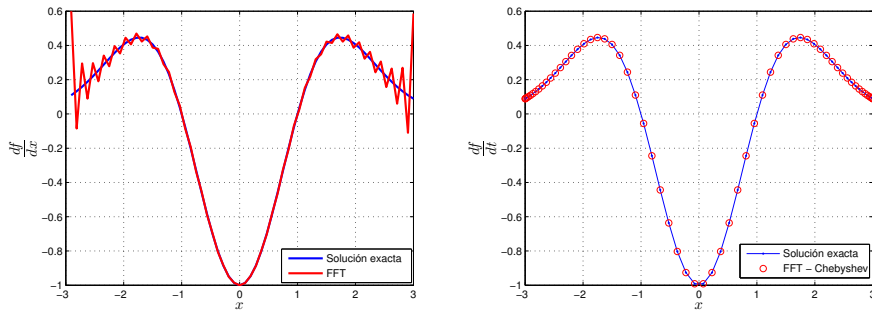


Figura 2.6: (Izquierda) aproximación de la derivada de la función $f(x) = -xe^{-x^2/2}$ usando derivación espectral sobre nodos equiespaciados y (derecha), usando derivación espectral de Chebyshev.

conocidas como “fenómeno de Gibbs” [84] producto de calcular la derivada de la función $f(x) = -xe^{-x^2/2}$, cuya derivada exacta es $\frac{df}{dx} = (x^2 - 1)e^{-x^2/2}$, usando la fórmula (2.14). Esto se debe a que, en el intervalo donde se ha discretizado la función $([-\pi, \pi])$, ésta no converge lo suficientemente rápido a cero. En el lado derecho de esta figura se puede ver la derivada de la misma función calculada mediante la derivación espectral de Chebyshev. Nótese cómo al usar nodos Chebyshev ya no aparecen oscilaciones en los extremos de la aproximación de la derivada.

2.3.2. Métodos sin malla.

Otro de los métodos usados en la solución numérica de modelos hidrodinámicos son los métodos sin malla. Estos métodos, como su nombre indica, se diferencian de los métodos de diferencias finitas y los métodos espectrales en que no necesitan una malla estructurada, ni una discretización equiespaciada que dé soporte a la solución numérica, lo cual reduce el tiempo de

cómputo, ya que se elimina el coste computacional requerido para construir la malla. Estos métodos son especialmente útiles en la solución de problemas con dominios complejos, que tengan condiciones de contorno mixtas o cuyas condiciones iniciales sean discontinuas. En esta sección haremos un breve repaso de los conceptos generales de dos métodos sin malla: el método de partículas y el método de funciones de base radial (RBF), que se utilizarán en los capítulos 6 y 7, respectivamente.

2.3.2.1. Funciones de base radial.

Los métodos de Funciones de Base Radial (RBF) fueron estudiados por primera vez en 1968 por Ronald Hardy, un especialista en geodesia de la universidad de Iowa State, el cual desarrolló uno de los primeros métodos efectivos para la interpolación de datos no estructurados [69]. Posteriormente, en 1979, Richard Franke [39] publicó un estudio sobre todos los métodos de interpolación de datos no estructurados conocidos por entonces. Luego, en 1986 Charles Micchelli, un matemático de IBM, desarrolló la teoría de los métodos con RBF multicuádricas. Cuatro años más tarde, el físico Edward Kansa usa por primera vez las RBF multicuádricas para resolver EDPs. A partir de los trabajos de Kansa los métodos de solución de EDPs con RBF consiguen un rápido desarrollo. En la actualidad, las RBF son consideradas herramientas efectivas para resolver EDPs.

La idea básica de los métodos de interpolación con RBF consiste en aproximar una función $f(x)$ mediante su expansión en un conjunto de funciones de base radial. Esto es, dado un conjunto de N puntos llamados centros $\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^N$, $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$, donde d es la dimensión del espacio, y los correspondientes valores $\{f_j\}_{j=1}^N$. Se aproxima la función $f(x)$ por

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(r_j(\mathbf{x})), \quad (2.25)$$

donde $\phi(r_j)$ es la función RBF, $r_j(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|$ es la distancia euclídea de un punto \mathbf{x} al centro \mathbf{x}_j y $\{\lambda_j\}_{j=1}^N$ son los coeficientes.

Por tanto, resolver (2.25) equivale a encontrar los coeficientes λ_j imponiendo la condición

$$S(\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i)$$

sobre un conjunto de centros.

Si la condición anterior se impone sobre los N centros, lo que se obtiene es

un sistema $N \times N$ de ecuaciones lineales.

$$A\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{f} \quad (2.26)$$

donde la matriz A es llamada matriz de interpolación mientras que $\boldsymbol{\lambda}$ y \mathbf{f} son vectores de dimensión $N \times 1$.

Los elementos de la matriz de interpolación tienen la forma

$$A_{ij} = \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|), \quad i, j = 1, \dots, N \quad (2.27)$$

Una vez que hemos encontrado los valores de los coeficientes λ_j resolviendo (2.26), para calcular la aproximación de f en un punto \mathbf{x} , basta con evaluar la expansión (2.25) en dicho punto.

Es obvio que la solución única del sistema (2.26) existe si y sólo si la matriz A es invertible. Al respecto, S. Sarra en [69] expone una versión simplificada del teorema de Micchelli que dice que si las funciones de base radial $\phi(r)$ son completamente monótonas y no constante en el intervalo $(0, \infty)$, entonces para un conjunto de N centros distintos $\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^N$, la matriz A es invertible.

Aproximación de funciones mediante RBF globales.

Los métodos de aproximación mediante RBF pueden ser globales o locales. El enfoque global usa información de cada uno de los centros del dominio para aproximar el valor de una función o su derivada en un solo punto. En cambio, el método local sólo usa un pequeño subconjunto de centros disponibles.

Tabla 2.1: Funciones de Base Radial (RBF).

Nombre de la RBF	Función radial
Gaussianas (GA)	$\phi(r, \varepsilon) = e^{-\varepsilon^2 r^2}$
Inv. Cuádrica (IQ)	$\phi(r, \varepsilon) = 1/(1 + \varepsilon^2 r^2)$
Inv. Multicuádrica (IMQ)	$\phi(r, \varepsilon) = 1/(\sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2})$
Multicuádrica (MQ)	$\phi(r, \varepsilon) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}$

Las RBF más comunmente usadas son las cuatro que aparecen en la tabla 2.1, ya que con ellas se logra una precisión espectral.

En la década de los años 80, R. Franke [39] presentó un trabajo donde compara todos los métodos de interpolación. En este trabajo concluye que, las RBF multicuádricas (RBF-MQ), son las más eficientes funciones radiales

disponibles hasta esa fecha y, actualmente, se puede considerar que son las RBF más populares. Por otro lado, las RBF - MQ poseen una serie de características que las distinguen, como por ejemplo, son funciones infinitamente diferenciables ($C^\infty[0, \infty)$) y condicionalmente positivas de orden uno [70].

Nótese que todas las RBF listadas en la tabla 2.1 contienen una variable libre conocida como parámetro de forma, que en esta tesis, siguiendo la notación de Sarra [69], denotaremos como ε . Sin embargo en la literatura clásica sobre RBF, las multicuádras son definidas comunmente como $\phi(r, c) = \sqrt{r^2 + c^2}$, que es equivalente a la que aparece definida en la tabla con $c = \frac{1}{\varepsilon}$, e ignorando el factor de escala ε .

Este parámetro afecta tanto al condicionamiento de la matriz del sistema, A , como a la precisión del método RBF. El condicionamiento de la matriz A se mide mediante el *número de condición* [69], definido como

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| = \frac{\sigma_{\text{máx}}}{\sigma_{\text{mín}}} \quad (2.28)$$

donde σ son los valores singulares de A . Una matriz bien condicionada tendrá un número de condición bajo mientras que una matriz mal condicionada tendrá un número de condición alto.

En las RBF si escogemos un parámetro de forma ε pequeño, se obtiene una buena precisión para el método, sin embargo, esto hace que la matriz del sistema se vuelva mal condicionada. Así que, con el propósito de que la matriz del sistema esté bien condicionada, el parámetro de forma no debe ser muy pequeño. Es decir, *no es posible tener una buena precisión y un buen condicionamiento a la vez*. Esto se conoce como el *Principio de Incertidumbre* [69].

Aproximación de las derivadas.

La expansión con RBF (2.25) se puede usar para aproximar la derivada de una función $f = f(\mathbf{x})$ de la siguiente manera

$$\frac{\partial}{\partial x_i} S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \frac{\partial}{\partial x_i} \phi(r_j(\mathbf{x})) \quad (2.29)$$

Cuando evaluamos (2.29) en los N centros $\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^N$, esta expresión se puede escribir como

$$\frac{\partial}{\partial x_i} S(\mathbf{x}) = H \boldsymbol{\lambda} \quad (2.30)$$

donde la matriz de evaluación H de tamaño $N \times N$ tiene elementos de la forma

$$H_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_i} \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|), \quad i, j = 1, \dots, N \quad (2.31)$$

Luego de (2.26) se tiene que $\boldsymbol{\lambda} = A^{-1}\mathbf{f}$, así que sustituyendo esta expresión en la ecuación (2.30) obtenemos la matriz de diferenciación

$$D = HA^{-1} \quad (2.32)$$

Por lo tanto la derivada de f se aproxima como

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \approx \frac{\partial}{\partial x_i} S(\mathbf{x}) = D\mathbf{f} \quad (2.33)$$

Para derivar la RBF $\phi(r(\mathbf{x}))$ se utiliza la regla de la cadena, obteniendo las fórmulas correspondientes a la primera y segunda derivada como sigue

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{d\phi}{dr} \frac{\partial r}{\partial x_i} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} = \frac{d\phi}{dr} \frac{\partial^2 r}{\partial x_i^2} + \frac{d^2 \phi}{dr^2} \left(\frac{\partial r}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.35)$$

donde

$$\frac{\partial r}{\partial x_i} = \frac{x_i}{r}$$

y

$$\frac{\partial^2 r}{\partial x_i^2} = \frac{1 - \left[\frac{\partial r}{\partial x_i} \right]^2}{r}$$

en particular para las RBF - MQ de la forma

$$\phi(r, \varepsilon) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2},$$

se tiene que

$$\frac{d\phi}{dr} = \frac{\varepsilon^2 r}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}} \quad (2.36)$$

y

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} = \frac{\varepsilon^2}{[1 + \varepsilon^2 r^2]^{3/2}} \quad (2.37)$$

Aproximación de funciones mediante RBF locales.

Si en lugar de aproximar el valor de una función mediante la información de cada uno de sus centros, usamos solamente un pequeño subconjunto de éstos, se dice que la aproximación se hace con RBF locales. Esto se debe a que, en

muchos casos, el método local puede ser tan preciso como el global. A pesar de que el método global es más fácil de programar, tiene la desventaja de que requiere resolver sistemas lineales cuyas matrices pueden convertirse en mal condicionadas al aumentar el número de nodos. Por otro lado, el método local requiere una menor cantidad de espacio de almacenamiento y de operaciones de coma flotante, además de que se logra un mejor condicionamiento de las matrices. Otra ventaja también es su flexibilidad en problemas con condiciones de contorno discontinuas.

La aproximación de funciones mediante RBF locales es análoga al método global.

Nuevamente, si f es la función que queremos aproximar, el problema se discretiza en un conjunto de N puntos $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$, llamados centros. En cada uno de los N centros, consideramos una interpolante local con RBF de la forma

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \phi(r_j(\mathbf{x})) \quad (2.38)$$

donde $r_j(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|$, $\{\lambda_j\}_{j=1}^n$ son los coeficientes de expansión local, ϕ es la RBF y n es el número de elementos de la molécula computacional formada por el centro y los $n - 1$ vecinos ($n \leq N$).

Luego, imponiendo la condición

$$f(\mathbf{x}_i) = f_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.39)$$

sobre cada molécula obtenemos un sistema lineal $n \times n$ de la forma

$$B\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{f} \quad (2.40)$$

que, al igual que el método global, es necesario resolver para encontrar el vector de coeficientes $\boldsymbol{\lambda}$. A la matriz B se le llama matriz de interpolación local y sus elementos tienen la forma

$$B_{ij} = \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|), \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (2.41)$$

Solución de EDPs con RBF globales.

Consideremos el siguiente problema de valor de frontera general sobre un dominio Ω con frontera $\partial\Omega$,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathcal{B}u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (2.42)$$

donde \mathcal{L} y \mathcal{B} son los operadores sobre el interior y la frontera de Ω , respectivamente.

Si $S(x)$ es una aproximación de la solución de (2.42), de acuerdo a (2.25) se tiene que

$$\begin{aligned}\mathcal{L}u(\mathbf{x}) &\approx \mathcal{L}S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \mathcal{L}\phi(r_j(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x}) \quad , \mathbf{x} \in \Omega \\ \mathcal{B}u(\mathbf{x}) &\approx \mathcal{B}S(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \mathcal{B}\phi(r_j(\mathbf{x})) = g(\mathbf{x}) \quad , \mathbf{x} \in \partial\Omega\end{aligned}$$

que en notación vectorial equivale a

$$\begin{aligned}[\mathcal{L}\Phi]_{N_I \times N} \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{f} \\ [\mathcal{B}\Phi]_{N_B \times N} \boldsymbol{\lambda} &= \mathbf{g}\end{aligned}$$

donde $\Phi_{ij} = \phi(r_j(\mathbf{x}_i))$ y N_I , N_B son el número de nodos del interior y de la frontera, respectivamente.

El valor de los coeficientes λ_j , se calculan resolviendo el sistema aumentado

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}\Phi \\ \mathcal{B}\Phi \end{bmatrix}_{N \times N} \boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

Finalmente la aproximación de la función se obtiene reemplazando el valor de estos coeficientes en la fórmula (2.25).

Solución de EDPs usando RBF-FD locales.

El método de RBF local puede ser considerado también como una generalización del método de diferencias finitas (FD) [9]. En las fórmulas de diferencias finitas, las derivadas de una función f en un punto dado, son aproximadas mediante una combinación lineal de valores de f en algunos nodos cercanos. El cálculo de las derivadas con diferencias finitas requiere encontrar unos pesos que son calculados usando polinomios de interpolación. Sin embargo, los nodos definidos en las moléculas computacionales de las fórmulas de diferencias finitas son ubicados sobre una malla estructurada, lo cual limita en forma considerable el método, sobre todo para problemas con geometrías complejas. Esta restricción no existe en las fórmulas de diferencias finitas RBF (RBF-FD), ya que estos pesos se pueden calcular exactamente mediante la interpolación sobre el conjunto de nodos vecinos. El procedimiento para

calcular dichos pesos es el siguiente [11]:

Consideremos una molécula computacional formada por un conjunto de nodos no estructurados $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$, vecinos a un nodo dado \mathbf{x}_0 y un operador diferencial \mathcal{L} . Para aproximar $\mathcal{L}f(\mathbf{x}_0)$ como una combinación lineal de valores de f en los n nodos no estructurados, se tiene

$$\mathcal{L}[f(\mathbf{x}_0)] \approx \sum_{j=1}^n \alpha_j f(\mathbf{x}_j) \quad (2.44)$$

donde los coeficientes de esta aproximación α_j son los pesos que queremos calcular. Para calcular dichos pesos, sustituimos en la expresión anterior la interpolación de la función f mediante RBF locales que definimos en (2.38) y obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$\mathcal{L}[\phi(r_i(\mathbf{x}_0))] = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi(r_i(\mathbf{x}_j)) \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.45)$$

Resolviendo este sistema obtenemos los valores de los pesos α_j .

La fórmula (2.45) se puede aplicar a la solución de un problema de valor de frontera (2.42), solo que, a diferencia del método global, en lugar de calcular los coeficientes de las RBF, lo que se calcula son los pesos de cada uno de los elementos de la molécula computacional. Esto es

$$\mathcal{L}[\phi(r_i(\mathbf{x}_I))] = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi(r_i(\mathbf{x}_j)) \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.46)$$

$$\mathcal{B}[\phi(r_i(\mathbf{x}_B))] = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi(r_i(\mathbf{x}_j)) \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.47)$$

donde \mathbf{x}_I y \mathbf{x}_B son los nodos correspondientes a los puntos interiores y la frontera, respectivamente. Con lo cual para resolver el problema es necesario calcular N_I sistemas de tamaño $n \times n$ para calcular el valor de la función en cada nodo interior y N_B sistemas de tamaño $n \times n$ para los nodos sobre la frontera.

Fórmulas para derivadas RBF-FD.

En ciertos casos, es posible calcular los pesos de cada elemento de la molécula computacional mediante fórmulas exactas. En las referencias [9, 10, 11] se han desarrollado fórmulas exactas para los pesos de las RBF-FD usando las RBF multicuádricas

$$\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|, c) = \sqrt{c^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|^2} \quad (2.48)$$

donde $c = \frac{1}{\varepsilon}$ es el parámetro de forma usado en las fórmulas. Por ejemplo, si aproximamos la primera derivada de una función f mediante RBF-FD usando $n = 3$ nodos equiespaciados, se tienen

$$f'(x_0) \approx \alpha_{-1}f(x_1 - h) + \alpha_0f(x_0) + \alpha_1f(x_0 + h) \quad (2.49)$$

donde $h = x_1 - x_0$. Entonces, sustituyendo la función f por las RBF multi-cuádricas centradas en $x_0 - h, x_0$ y $x_0 + h$, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales. Luego los pesos se encuentran resolviendo este sistema

A continuación presentamos un resumen de cada una de estas fórmulas tanto para las derivadas de primer orden como las de segundo orden, el Laplaciano y las condiciones de contorno, utilizando nodos equiespaciados. Estas fórmulas las usaremos en la solución numérica del modelo de Drift-Diffusion para un dispositivo MESFET mediante RBF-FD locales en el capítulo 7 de esta tesis.

Pesos para la primera derivada.

Para una molécula computacional formada por $n = 3$ nodos estructurados equiespaciadamente x_{-1}, x_0, x_1 , la fórmula exacta para los correspondientes pesos $[\alpha_{-1}, \alpha_0, \alpha_1]$, de la primera derivada son

$$\alpha_0 = 0, \quad \alpha_{-1} = -\alpha_1 = \frac{h}{\sqrt{c^2 + h^2}(c - \sqrt{c^2 + 4h^2})} \quad (2.50)$$

donde $h = x_1 - x_0$.

Pesos para la segunda derivada.

Para una molécula computacional formada por $n = 3$ nodos estructurados equiespaciadamente x_{-1}, x_0, x_1 , la fórmula exacta para los correspondientes pesos $[\alpha_{-1}, \alpha_0, \alpha_1]$, de la segunda derivada son

$$\alpha_0 = -\frac{2c^3 + 2c^2\sqrt{c^2 + 4h^2} + h^2\sqrt{c^2 + 4h^2} + 3ch^2}{2c^3h^2 + 3ch^4}, \quad (2.51)$$

$$\alpha_{-1} = -\alpha_1 = \frac{h^2(2c^2 + h^2)(c - \sqrt{c^2 + 4h^2})}{2c(c^2 + h^2)^{3/2}(c^3 - c^2\sqrt{c^2 + 4h^2} - h^2\sqrt{c^2 + 4h^2} + 3ch^2)} \quad (2.52)$$

Pesos para el Laplaciano.

Los pesos del operador Laplaciano $\nabla^2 = \partial_{xx} + \partial_{yy}$ en dos dimensiones sobre una molécula computacional de 5 nodos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^5$ estructurados equiespaciadamente $[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5]$, siguiendo en orden convencional usado en

[8, 91], se pueden calcular usando las siguientes fórmulas

$$\alpha_1 = -\frac{2+(ch^2+2)\sqrt{1+4ch^2}+3ch^2}{2h^2(1+ch^2)} \quad (2.53)$$

$$\alpha_{2,3,4,5} = \frac{2+(ch^2+2)\sqrt{1+4ch^2}+5ch^2+3ch^4}{4h^2(1+ch^2)^{3/2}} \quad (2.54)$$

Si la discretización en la componente x no es la misma que la componente y , basta con sustituir $h = hy$ en la fórmula para los pesos $\alpha_{2,4}$ y $h = hx$ en la fórmula de los pesos $\alpha_{3,5}$. Donde $hy = y_i - y_{i-1}$ y $hx = x_i - x_{i-1}$.

Pesos para condiciones de contorno de tipo Neumann y Dirichlet.

El modelo de Drift-Diffusion que resolveremos en el capítulo 7, contiene ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que poseen condiciones de contorno de tipo Neumann y Dirichlet.

Siguiendo el mismo procedimiento usado en [9], es posible obtener fórmulas para las condiciones de contorno de tipo Neumann. Las fórmulas correspondientes a los pesos para $n = 3$ nodos son las siguientes:

$$\alpha_1 = \frac{3c}{\sqrt{c^2+4h^2}+3} \quad (2.55)$$

$$\alpha_2 = \frac{c(c+\sqrt{c^2+4h^2})+h^2}{h*\sqrt{c^2+4h^2}\sqrt{c^2+h^2}} \quad (2.56)$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{3}\alpha_1 \quad (2.57)$$

donde α_1 es el nodo frontera y $\alpha_{2,3}$ son nodos interiores.

Finalmente, los pesos para las condiciones de contorno de tipo Dirichlet consiste simplemente en colocar $\alpha_1 = 1$ en el nodo frontera y $\alpha_{2,3} = 0$ en los demás nodos.

2.3.2.2. Método de partículas.

En los modelos hidrodinámicos, por lo general las variables que describen la evolución del sistema, lo hacen mirando desde un marco fijo en el espacio, esto es lo que se conoce como representación Euleriana de la hidrodinámica [5]. Sin embargo, para muchos problemas, es más conveniente escoger coordenadas que se muevan con el material y observar los elementos fluidos individuales en lugar de puntos fijos en el espacio. Esto conduce a lo que se denomina representación hidrodinámica Lagrangiana. Esta representación es

particularmente útil para problemas 1D donde las variables fluidas dependen de una coordenada espacial x . Es por ello que este método nos resultará muy útil para resolver numéricamente el problema 1D que se plantea en el capítulo 6.

En una representación Lagrangiana, el movimiento de la partícula fluida es descrito mediante la especificación de sus coordenadas como función del tiempo, esto es $x = x(t)$. La línea que conecta todos los puntos se llama trayectoria de la partícula [50]. Para una partícula que se mueve con el tiempo, la trayectoria comienza en el tiempo $t = t_0$ en un punto $x_0(t_0)$.

El movimiento del fluido está completamente descrito si se conoce el vector de posición x como una función del tiempo, esto es

$$x = f(x_0, t) \quad (2.58)$$

La velocidad se obtiene derivando el vector de posición con respecto al tiempo

$$\frac{dx}{dt} = v(x, t) \quad (2.59)$$

Esta aproximación Lagrangiana del movimiento es el punto de partida de los métodos de partículas. Los métodos de partículas aproximan la solución de las ecuaciones del flujo usando una nube de puntos que se mueve con el flujo. Como por ejemplo los métodos de vórtices, y el método SPH *Smoothed Particle Hydrodynamics* [52, 73]. Este último, fue uno de los primeros métodos sin malla utilizados, sobre todo, en la solución de problemas de astrofísica. Los primeros trabajos sobre este método fueron presentados por Lucy, Gingold y Monaghan en 1977 [41, 55].

Los métodos de partículas han sido estudiados extensivamente y extendida su aplicación tanto a problemas de resistencia de materiales como a la dinámica de fluidos de flujos con grandes deformaciones. Como la velocidad no depende del espaciado de las partículas sino de su posición, esta propiedad le concede una ventaja especial sobre los métodos con malla fija. Esta ventaja es su adaptabilidad a la distribución que tengan las partículas. Es decir, la formulación del método de partículas no se ve afectada por la forma en que se distribuyen las partículas, lo cual hace del método una muy buena herramienta para el estudio de problemas en los que la distribución de los puntos presentan fuertes discontinuidades.

En un método de partículas las ecuaciones se describen la dinámica se discretizan desde un punto de vista Lagrangiano. De esta manera, la derivada material $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla$ se convierte en una simple derivada temporal.

Por tanto, las partículas transportan los valores de la función y se mueven con sus velocidades características. Esto proporciona un método de solución simple y preciso para leyes de conservación, sin tener que aproximar derivadas espaciales [35, 36].

Tomemos como ejemplo la forma más simple de una ley de conservación escalar unidimensional

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x) \quad (2.60)$$

con f' continua. El sistema correspondiente desde un punto de vista Lagrangiano será

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f'(u) \\ \frac{du}{dt} = 0 \end{cases} \quad (2.61)$$

El primer paso del método de partícula es aproximar la función inicial u_0 mediante un número finito de puntos $x_1 \leq \dots \leq x_m$ con los correspondientes valores de la función u_1, \dots, u_m . La evolución de la solución se encuentra moviendo cada partícula x_i con velocidad $f'(u_i)$. Esto es posible mientras que no ocurra una “colisión” entre las partículas. Para seguir adelante, es necesario una gestión de las partículas [36], es decir cuando dos partículas choquen fusionarlas en una sola, mientras que cuando la distancia entre ellas sea muy grande insertar nuevas partículas en el espacio que hay entre ambas. Esto es posible en el método de partículas, debido a que la posición de cada partícula no depende de la distancia a cual se encuentra de las partículas vecinas.

Sin embargo, las ventajas que brinda el método de partículas tienen su precio:

- Como el movimiento de la partícula es determinado por el flujo, el control del movimiento de las mismas se pierde. Por lo que, como ya vimos, se requiere un procedimiento de administración de partículas.
- Los operadores diferenciales tiene que ser aproximados sobre una nube de puntos no estructurados.

2.3.3. Métodos para la integración de la variable temporal.

El modelo hidrodinámico que resolveremos numéricamente en los capítulos 3 al 6 está descrito mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales

en derivadas parciales dependientes del tiempo. Al resolver la parte espacial del problema empleando métodos espectrales, el mismo queda reducido a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para la variable temporal, que se resuelve generalmente empleando métodos de diferencias finitas. En esta sección presentamos una breve descripción de los métodos que hemos empleado, conjuntamente con los métodos espectrales, en la solución de los modelos planteados.

Consideremos una ecuación de evolución [23]

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= f(u, t), & t > 0 \\ u(x, 0) &= u_0,\end{aligned}\tag{2.62}$$

Si empleamos métodos espectrales para aproximar f , el resultado da lugar a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de la forma

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_t &= \mathbf{F}(\mathbf{u}, t), & t > 0, \\ \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_0\end{aligned}\tag{2.63}$$

donde \mathbf{u} y \mathbf{F} son vectores que contienen las incógnitas y las aproximaciones espectrales de los operadores espaciales, respectivamente.

La elección de un método para la integración de la variable temporal está determinado por varios factores tales como la precisión que se desea, el coste computacional, la memoria disponible y la no linealidad de las ecuaciones.

Para la integración de la variable temporal del modelo hidrodinámico objeto de estudio de esta tesis, hemos empleado métodos explícitos e implícitos para contruir un esquema acorde con la complejidad de las ecuaciones.

2.3.3.1. Métodos explícitos.

De acuerdo con Boyd [20], los métodos explícitos para el avance del tiempo de ecuaciones hiperbólicas, están inevitablemente limitados a la condición de CFL (Courant-Friedrich Levy). Esto es, todo método explícito tiene un tiempo límite τ_{max} para el paso de tiempo Δt , de modo que cuando se excede este límite, el error de aproximación crece exponencialmente. Todos los métodos explícitos tienen un τ_{max} finito. Para obtener un valor preciso para τ_{max} , es necesario analizar individualmente cada combinación de discretización espacial y temporal para cada problema específico. Sin embargo, es posible ofrecer una estimación. En problemas de difusión y de propagación de ondas [20], los límites son

$$\tau_{max} = d \frac{h}{c_{max}} \quad (\text{Ondas}) \qquad \tau_{max} = d' \nu h^2 \quad (\text{Difusión}) \tag{2.64}$$

donde d y d' son constantes de $O(1)$, c_{max} es la velocidad de la onda más rápida, ν es el coeficiente de viscosidad o de difusión y $h \equiv \min_j |x_j - x_{j+1}|$.

Los métodos explícitos más populares para la integración del tiempo, usando métodos espectrales, son el esquema de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4) y el método de Adams-Bashforth de tercer orden (AB3).

A continuación presentamos los esquemas correspondientes a cada método.

Esquema de Runge-Kutta de Cuarto Orden

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_1 &= \mathbf{F}(\mathbf{u}^n, t_n), \\
 \mathbf{K}_2 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_1, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\
 \mathbf{K}_3 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_2, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\
 \mathbf{K}_4 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_3, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\
 \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^n + \frac{1}{6}\Delta t [\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4]
 \end{aligned} \tag{2.65}$$

Esquema de Adams-Bashforth de Tercer Orden

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[\frac{23}{12}\mathbf{F}(\mathbf{u}^n, t^n) - \frac{4}{3}\mathbf{F}(\mathbf{u}^{n-1}, t^{n-1}) + \right. \\
 \left. + \frac{5}{12}\mathbf{F}(\mathbf{u}^{n-2}, t^{n-2}) \right]
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

De acuerdo con Gottlieb y Orszag [42], las condiciones de estabilidad para estos métodos son, respectivamente

$$\Delta t < \frac{\sqrt{2}}{\pi(N-1)} \quad (\text{RK4}) \quad \text{y} \quad \Delta t < \frac{8}{N^2} \quad (\text{AB3}) \tag{2.67}$$

Nótese que aunque estos métodos son bastante restrictivos en cuanto al límite para el paso temporal, poseen ciertas características que resultan ventajosas para los métodos espectrales. Así tenemos que, con el método (RK4) al ser de cuarto orden no hay que sacrificar tanto la convergencia espectral que se obtiene con los métodos espectrales en la discretización espacial [47, 92]. Por otro lado, este método es de “auto-arranque”, es decir no requiere el uso de otro esquema adicional para calcular el valor de la solución en el primer paso

de tiempo. Sin embargo, la desventaja que tiene es que se necesita evaluar cuatro veces el vector \mathbf{F} , con lo que el coste computacional es alto.

Por otro lado, el método AB3 requiere una fase de inicialización en la que \mathbf{u}^1 y \mathbf{u}^2 deben ser calculados a partir de la condición inicial \mathbf{u}^0 mediante otro esquema, como un RK4 por ejemplo. Sin embargo el AB3 es estable, robusto y menos costoso en paso de tiempo que el RK4, por esta razón es usado frecuentemente para los problemas donde se emplean una discretización sobre nodos Chebyshev [23, 42]. De modo que una combinación de estos dos métodos explícitos es frecuentemente usada.

2.3.3.2. Métodos implícitos.

Los métodos implícitos poseen una región de estabilidad mucho más grande que los explícitos. En particular el Método de Crank-Nicholson (CN), que es uno de los más usados con métodos espectrales, es incondicionalmente estable. El esquema correspondiente a este método es

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{2}\Delta t [\mathbf{F}(\mathbf{u}^{n+1}, t^{n+1}) + \mathbf{F}(\mathbf{u}^n, t^n)] \quad (2.68)$$

El método de CN es de segundo orden y se usa en problemas de difusión, sin embargo en los problemas de ondas tiene la desventaja de que amortigua los componentes de alta frecuencia muy débilmente, pues, en realidad, estos componentes decaen muy rápidamente [23]. Por otro lado, como se trata de un método implícito, para obtener el valor de \mathbf{u} en el “siguiente instante de tiempo”, debe resolverse un sistema de ecuaciones en cada paso de tiempo.

2.3.3.3. Métodos semi-implícitos.

Cuando se resuelven sistemas de ecuaciones hiperbólicas no lineales usando métodos espectrales en la parte espacial, si se usan métodos explícitos para resolver la integración del tiempo nos encontramos con condiciones de estabilidad muy rigurosas [42], lo cual conlleva un coste computacional muy alto. Mientras que si se usan en su lugar métodos implícitos tales como el CN, donde no tendríamos el obstáculo de la condición de estabilidad, el precio a pagar sería también el tiempo de computo ya que para problemas no lineales, es necesario resolver un sistema de ecuaciones no lineal en cada paso de tiempo.

La solución para este problema, tal y como lo plantean Gottlieb, Orszag y Boyd [20, 42], es usar un método semi-implícito a fin de relajar la condición

de estabilidad.

Definición: [20] Si algunos términos en un sistema de ecuaciones diferenciales son aproximados mediante un esquema explícito mientras que otros son aproximados implícitamente, entonces el algoritmo de avance del tiempo se dice que es *Semi-Implícito*.

Por ejemplo, para una EDP no lineal de la forma

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{F}(\mathbf{u}, x, t) + \mathbf{L}(\mathbf{u}, x, t) \quad (2.69)$$

donde \mathbf{F} y \mathbf{L} denotan la parte no lineal y lineal de la ecuación diferencial, respectivamente, un esquema semi-implícito muy común es el *Adams-Bashforth 3 - Crank-Nicholson* (AB3CN)

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{L}(\mathbf{u}^{n+1}, t^{n+1}) = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[\frac{23}{12} \mathbf{F}(\mathbf{u}^n, t^n) - \frac{4}{3} \mathbf{F}(\mathbf{u}^{n-1}, t^{n-1}) + \right. \\ \left. + \frac{5}{12} \mathbf{F}(\mathbf{u}^{n-2}, t^{n-2}) - \frac{\mathbf{L}(\mathbf{u}^n, t^n)}{2} \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

En el esquema AB3CN, como se puede ver, combinamos el método de Adams - Brashforth de tercer orden explícito sobre la parte no lineal, con el esquema Crank - Nicholson implícito de segundo orden sobre la parte lineal. La principal ventaja de este método es que como el término no lineal es tratado explícitamente, sólo es necesario resolver un sistema de ecuaciones diferenciales lineales en cada paso de tiempo, a la vez que no es necesario imponer condiciones tan rigurosas para Δt . En otras palabras, el algoritmo semi-implícito estabiliza los términos no lineales del problema. Este Algoritmo es el que utilizaremos en los capítulos 3 y 4 para resolver el problema de integración de la variable temporal.

Capítulo 3

Métodos espectrales aplicados a la dinámica de corrientes 2D inyectadas ópticamente.

3.1. Introducción.

En la sección 2.2.1 del capítulo 2 hablamos en forma general de los procesos de inyección óptica de portadores. Como ya mencionamos entonces, estudios recientes han comprobado experimentalmente [31, 32, 80, 81], que es posible generar balísticamente una corriente en los portadores haciendo incidir dos haces de luz láser [68]. La investigación de la dinámica que se produce en los portadores mediante los fenómenos de inyección óptica, permite determinar la distancia a la que dichos portadores pueden propagarse y los patrones de densidad de carga que pueden formarse. Esto es importante para el diseño de dispositivos semiconductores tales como transistores, detectores de luz de carga acoplada, láseres de cascada y diodos emisores de luz [1]. Comunmente, el análisis de la dinámica completa de sistemas fuera del equilibrio requiere un esfuerzo computacional intensivo basado en simulaciones Monte Carlo [61]. En particular, para sistemas bidimensionales este análisis se basa en enfoques de cinética cuántica que son numéricamente muy exigentes y a menudo poco factibles. En ese sentido Abrarov, Sherman y Sipe [1], han propuesto un modelo hidrodinámico bidimensional que describe la dinámica de estas corrientes inyectadas ópticamente asumiendo que los huecos son infinitamente pesados, lo cual significa que la distribución de la densidad de los mismos no cambia con el tiempo. Las colisiones entre los portadores

y su interacción con el entorno son modelados por un conjunto de tiempos característicos cuyos valores se han determinado mediante las condiciones experimentales.

El esquema geométrico del problema lo constituye un dispositivo formado por un conjunto de pozos cuánticos (MQW) espaciados en el eje z , tal y como se puede ver en la figura 3.1. En este dispositivo la corriente es generada mediante la interferencia cuántica de la transición de un fotón (con frecuencia 2ω y fase $\phi_{2\omega}$) y de la transición de dos fotones (con frecuencia ω y fase ϕ_ω), a través de la banda prohibida (“band gap”) \mathbf{E}_g [1]. El control de la magnitud y la dirección de la corriente se logra variando el parámetro de control $\Delta\phi \equiv \phi_{2\omega} - 2\phi_\omega$, que depende de las fases $\phi_{2\omega}$ y ϕ_ω de los componentes del pulso láser. Para un valor no nulo de $\Delta\phi$ se rompe la simetría en el espacio de momentos y se genera una corriente macroscópica con velocidad $U_0 = v_e |\sin \Delta\phi|$ en dirección paralela a la superficie. La velocidad máxima v_e , de los electrones inyectados, es función de ω y \mathbf{E}_g y alcanza los 10^3 km/s para $2\hbar\omega - \mathbf{E}_g$ del orden de 100 meV [76]. Esta corriente inyectada genera una separación en los electrones y los huecos que origina fuerzas de Coulomb con elevada no uniformidad. Estas fuerzas pueden provocar el desarrollo de patrones de carga y densidad de corriente que pueden conducir a inestabilidades y posibles no linealidades [76].

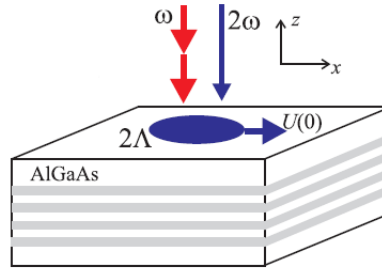


Figura 3.1: Esquema de la inyección óptica de corriente en el dispositivo de múltiple pozos cuánticos (MQW)[1].

El modelo resultante fue resuelto numéricamente por Sherman *et al.*

[1, 2, 76] usando una expansión basada en polinomios de Hermite-Gauss, reduciendo el problema a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para la evolución temporal de los coeficientes de la expansión. El punto clave de este enfoque numérico se basa en el análisis con bases finitas. En un régimen sobreamortiguado, cuando las interacciones de Coulomb no son fuertes, se puede usar una base relativamente pequeña, pero cuando los sistemas analizados están en un régimen con fuertes interacciones de Coulomb, es necesario extender la base. Por lo tanto, el número de elementos de la base se tiene que escoger dependiendo del régimen analizado, lo cual representa una debilidad de la expansión de Hermite-Gauss usada. Para eludir esta dificultad, en esta tesis proponemos usar, en su lugar, los métodos espectrales. Para ello usaremos la Transformada Rápida de Fourier (FFT) para aproximar numéricamente la parte espacial de las ecuaciones diferenciales que definen el modelo hidrodinámico. Al usar métodos espectrales conseguimos no solo una mejor precisión en la solución del problema, sino también mayor rapidez en los cálculos.

La no linealidad de las ecuaciones sumada a los complejos patrones que aparecen en las soluciones, hacen que la integración de la variable temporal se convierta también en un reto más. Para eludir este problema planteamos un método semi-implícito, el cual nos permite separar la parte lineal de la no lineal, logrando así resolver el problema temporal, sin necesidad de considerar pasos de tiempo demasiado pequeños que retarden el tiempo de cálculo.

Los resultados obtenidos combinando los métodos espectrales para calcular las derivadas espaciales y las integrales que definen los campos eléctricos y el método semi-implícito para el problema temporal muestran una alta concordancia con los obtenidos por Abrarov, Sherman y Sipe, con la ventaja de que con nuestro método es posible obtener soluciones para tiempos largos sin que aparezcan inestabilidades en los resultados numéricos, lo cual nos ha permitido estudiar, además, un caso límite cuya dinámica presenta patrones muy complejos.

3.1.1. Organización del capítulo.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera:

En la sección 3.2 se presentan las ecuaciones del modelo hidrodinámico propuesto en [1] por Sherman y sus colaboradores y el proceso de adimensionalización de las ecuaciones. En la sección 3.3 presentamos los métodos numéricos que hemos empleado en la resolución de este modelo. Explicamos detalladamente las fórmulas para calcular la derivación espectral, la convo-

lución y los métodos para la integración de la parte temporal del problema. La sección 3.4 contiene los resultados de la solución numérica del modelo, haciendo una comparación con los resultados obtenidos por Sherman *et al.* en [1, 76]. También se presenta la solución del modelo para el límite distinguido obtenido haciendo crecer el tiempo de relajación de los electrones τ_e . Finalmente en la sección 3.5 se presentan las conclusiones de este capítulo.

3.2. Ecuaciones del modelo.

La dinámica de la corriente bidimensional generada mediante inyección óptica se describe mediante la ecuación de continuidad para la densidad de electrones y por la ecuación de Euler,

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} + \nabla(N_e \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{e\mathbf{E}}{m_e} - \frac{\mathbf{u}}{\tau_{eh}} \frac{N_h}{N_0} - \frac{\mathbf{u}}{\tau_e}, \quad (3.2)$$

donde $N_e(\mathbf{r}, t)$ es la distribución de la densidad de los electrones, $N_h(\mathbf{r})$ la distribución de la densidad de los huecos (asumiremos que es conocida y estable), y $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r}, t)\mathbf{i} + v(\mathbf{r}, t)\mathbf{j}$, es la velocidad media local. $\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^h$ es el campo macroscópico de Coulomb producido por electrones y huecos respectivamente, m_e es la masa efectiva del electrón, e es la carga elemental, $N_0 = qN_s$ es la densidad total inicial, donde q es el número de pozos cuánticos y N_s es la densidad inicial en cada pozo.

Nótese que en este modelo N_e y \mathbf{u} dependen de la variable espacial bidimensional $\mathbf{r} = (x, y)$ y del tiempo t , a excepción de la densidad de distribución de los huecos N_h que es independiente del tiempo, ya que por simplicidad se considera que los huecos son infinitamente pesados [1].

Por otro lado, existe un conjunto de tiempos característicos que han sido determinados mediante condiciones experimentales: τ_{eh} es el tiempo de arrastre producido por las fuerzas de Coulomb en las colisiones electrón-hueco y τ_e es el tiempo de relajación para los electrones debido a factores externos como fonones e impurezas que conduce a la relajación del momento total. El tiempo característico asociado a las fuerzas de Coulomb está dado por la inversa de la frecuencia del plasma,

$$\Omega_{pl} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N_0 e^2 \pi^{3/2}}{\varepsilon m_e \Lambda}} \quad (3.3)$$

La distribución inicial de los portadores en un único pozo está dado por $N_{e,h}^s(\mathbf{r}, t = 0) \equiv N_s \exp(-\mathbf{r}^2/2\Lambda^2)$, donde Λ es el tamaño característico de la región donde inciden los haces. La concentración total inicial de los portadores es $N_{e,h}(\mathbf{r}, t) = qN_{e,h}^s(\mathbf{r}, t)$.

En este modelo también cobra una relevante importancia el campo eléctrico de Coulomb producido por electrones y huecos que se define respectivamente como:

$$\mathbf{E}^e(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{\varepsilon} \int \int_D N_e(\mathbf{r}', t) \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^2\mathbf{r}', \quad (3.4)$$

$$\mathbf{E}^h(\mathbf{r}) = \frac{e}{\varepsilon} \int \int_D N_h(\mathbf{r}') \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^2\mathbf{r}', \quad (3.5)$$

donde D es el dominio de integración y ε es la constante dieléctrica.

Los núcleos de las integrales que definen estos campos eléctricos poseen singularidades que dificultan la resolución numérica del sistema de ecuaciones (3.1)-(3.2) y las mismas sólo tienen sentido si se consideran como valor principal.

3.2.1. Ecuaciones adimensionales.

A continuación presentamos la adimensionalización de las ecuaciones (3.1)-(3.2). En las tablas 3.1 y 3.2 aparecen las constantes físicas y los valores característicos que usaremos en la adimensionalización de las mismas.

Usando las variables adimensionales:

$\hat{x} = x/[x]$; $\hat{y} = y/[y]$; $\hat{u} = u/[u]$; $\hat{v} = v/[v]$; $\hat{N}_e = N_e/[N_e]$ y $\hat{N}_h = N_h/[N_h]$, y sustituyéndolas en las ecuaciones (3.1) y (3.2) se obtiene

$$\frac{\partial \hat{N}_e}{\partial \hat{t}} + [t] \left(\frac{[u]}{[x]} \frac{\partial(\hat{N}_e \hat{u})}{\partial \hat{x}} + \frac{[v]}{[y]} \frac{\partial(\hat{N}_e \hat{v})}{\partial \hat{y}} \right) = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{t}} + [t] \left(\frac{[u]}{[x]} \hat{u} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} + \frac{[v]}{[y]} \hat{v} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{y}} \right) = \\ - \frac{e^2 [t]}{\varepsilon m_e [u]} \int \int_D \frac{(\hat{N}_h [N_h] - \hat{N}_e [N_e])(\hat{x} - \hat{x}')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} d\hat{x}' d\hat{y}' - \hat{u} \left(\frac{[t]}{\tau_{eh} q} \frac{[N_h]}{N_s} \hat{N}_h + \frac{[t]}{\tau_e} \right), \end{aligned}$$

Tabla 3.1: Constantes físicas del modelo.

e	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
τ_{eh}	$150 \text{ fs} = 1.5 \times 10^{-13} \text{ s}$
τ_e	$80 \text{ fs} = 8.0 \times 10^{-14} \text{ s}$
m_e	$0.067 \text{ m} = 6.1037 \times 10^{-32} \text{ kg}$
m	$9.1096 \times 10^{-31} \text{ kg}$
N_s	$10^{11} \text{ cm}^{-2} = 10^{15} \text{ m}^{-2}$
$N_0 = qN_s$	$4.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2} \quad ; \quad 1.6 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$
Λ	$1.0 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$
ε_0	$8.854 \times 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2}$
ε	$12\varepsilon_0 = 1.0625 \times 10^{-10} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2}$
Ω_{pl}^{-1}	1.4 ps

Tabla 3.2: Valores característicos para las variables adimensionales.

Variable	Valor característico
$[x] = [y]$	Λ
$[t]$	τ_e
$[u] = [v]$	Λ/τ_e
$[N_e] = [N_h]$	N_s

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{t}} + [t] \left(\frac{[u]}{[x]} \hat{u} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{x}} + \frac{[v]}{[y]} \hat{v} \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{y}} \right) = \\ - \frac{e^2 [t]}{\varepsilon m_e [u]} \int \int_D \frac{(\hat{N}_h[N_h] - \hat{N}_e[N_e])(\hat{y} - \hat{y}')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} d\hat{x}' d\hat{y}' - \hat{v} \left(\frac{[t]}{\tau_{eh} q} \frac{[N_h]}{N_s} \hat{N}_h + \frac{[t]}{\tau_e} \right). \end{aligned}$$

Sustituyendo los valores característicos de la tabla 3.2 y quitando el sombrero a las variables adimensionales se obtiene

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} + \frac{\partial (N_e u)}{\partial x} + \frac{\partial (N_e v)}{\partial y} = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -a \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(x - x')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - u(1 + bN_h/q), \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -a \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(y - y')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - v(1 + bN_h/q), \quad (3.8)$$

Nótese que aparecen sólo dos parámetros adimensionales en estas ecuaciones,

$$a = \frac{e^2 \tau_e^2 N_s}{\varepsilon m_e \Lambda} \approx 0.00235, \quad b = \frac{\tau_e}{\tau_{eh}} \approx 0.5333 \quad (3.9)$$

que representan las relaciones entre los tiempos característicos de los tres términos del lado derecho de la ecuación de Euler (3.2).

Finalmente, las condiciones iniciales para la distribución de la densidad de los portadores son:

$$N_h = N_h(x, y) = q \exp(-(x^2 + y^2)/2) \quad \text{y} \quad N_e(x, y, t = 0) = q \exp(-(x^2 + y^2)/2),$$

y para las velocidades $u(x, y, 0) = U_0 \tau_e / \Lambda$ y $v(x, y, 0) = 0$, siendo U_0 la velocidad inicial de la corriente inyectada ($U_0 = v_e |\sin \Delta\phi|$).

3.3. Esquemas numéricos.

3.3.1. Cálculo del campo eléctrico mediante Transformada Rápida de Fourier (FFT).

El efecto de las fuerzas de Coulomb da lugar a las integrales que aparecen en el miembro derecho de las ecuaciones (3.7) y (3.8). Llamando I_1 e I_2 a estas integrales, respectivamente, se tiene que

$$I_1(x, y) = \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(x - x')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy'$$

$$I_2(x, y) = \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(y - y')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy'$$

Definiendo ahora los núcleos k_1 y k_2 como

$$k_1(x, y) = \frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \quad (3.10)$$

$$k_2(x, y) = \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \quad (3.11)$$

estas integrales se pueden escribir como

$$I_1(\bar{x}) = \int_D f(\bar{x}') k_1(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (3.12)$$

$$I_2(\bar{x}) = \int_D f(\bar{x}') k_2(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (3.13)$$

donde $f = N_h - N_e$, $\bar{x} = (x, y)$ y $\bar{x}' = (x', y')$.

Si f decrece suficientemente rápido en $\pm\infty$ entonces se tiene que

$$\int_D f(\bar{s}) k_1(\bar{x} - \bar{s}) d\bar{s} = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{s}) k_1(\bar{x} - \bar{s}) d\bar{s} = f * k_1$$

y

$$\int_D f(\bar{s}) k_2(\bar{x} - \bar{s}) d\bar{s} = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{s}) k_2(\bar{x} - \bar{s}) d\bar{s} = f * k_2$$

Así, las ecuaciones (3.12) y (3.13) se pueden escribir como

$$I_1 = f * k_1 \quad \text{y} \quad I_2 = f * k_2 \quad (3.14)$$

donde $f * k_1$ y $f * k_2$ son las convoluciones de f con k_1 y k_2 respectivamente. Estas convoluciones pueden ser calculadas eficientemente en el espacio de las frecuencias empleando para ello la propiedad de la transformada de Fourier de la convolución que definimos en (2.15). Esto es

$$I_1 = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{f} \cdot \hat{k}_1 \right\} \quad (3.15)$$

$$I_2 = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{f} \cdot \hat{k}_2 \right\} \quad (3.16)$$

donde \mathcal{F} = FFT (Transformada Rápida de Fourier) y \mathcal{F}^{-1} = IFFT es su inversa, $\hat{f} = \mathcal{F}(f)$, $\hat{k}_1 = \mathcal{F}(k_1)$ y $\hat{k}_2 = \mathcal{F}(k_2)$

Nótese que los núcleos k_1 y k_2 no dependen de la variable temporal, por lo tanto \hat{k}_1 y \hat{k}_2 solo necesitamos calcularlos una vez. Sin embargo, como se aprecia en la figura 3.2, dichos núcleos son singulares en el origen a la vez que decaen muy lentamente a cero conforme nos alejamos de él. Estas características no permiten calcular su transformada de Fourier de una manera eficiente (recordemos que la FFT requiere que las funciones sean suaves), y

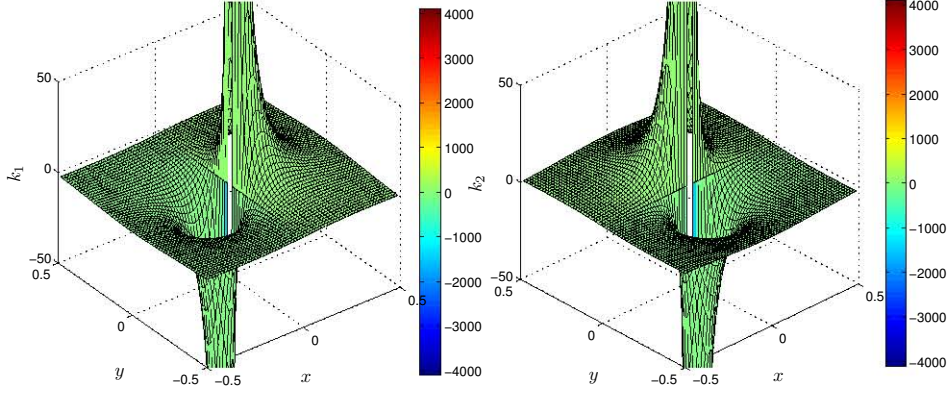


Figura 3.2: Gráficas de $k_1(x, y) = \frac{x}{(x^2+y^2)^{3/2}}$ (izquierda) y $k_2(x, y) = \frac{y}{(x^2+y^2)^{3/2}}$ (derecha).

obtener valores precisos. Para eludir el problema de la singularidad, calculamos directamente los coeficientes de la transformada de Fourier de k_1 y k_2 en lugar de usar la FFT.

Dada una función $g(x, y)$, los coeficientes de Fourier bidimensionales de g se calculan mediante la fórmula

$$C_g(m, n) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(x, y) e^{-i(mx+ny)} dx dy \quad (3.17)$$

Por ejemplo, los coeficientes de la transformada de Fourier de k_1 (3.10) son

$$C_{k_1}(m, n) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \right] e^{-i(mx+ny)} dx dy$$

donde $m, n = \frac{-N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}$ son los números de ondas discretizados sobre N nodos a lo largo de cada eje. Como el núcleo es impar y $\cos(mx + ny)$ es par en x , entonces la parte real de $C_{k_1}(m, n)$ es cero. Por lo tanto

$$C_{k_1}(m, n) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \sin(mx + ny) dx dy \quad (3.18)$$

Reemplazando y por x en el integrando de la fórmula (3.18) se obtiene una fórmula similar para calcular los coeficientes de Fourier de k_2 (3.11), esto es

$$C_{k_2}(m, n) = \frac{-i}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \sin(mx + ny) dx dy \quad (3.19)$$

De esta manera calculamos los coeficientes C_{k_1} y C_{k_2} numéricamente usando las fórmulas (3.18) y (3.19), mediante un método de cuadratura adaptativo. Como podemos observar, el valor de cada coeficiente depende de los valores de los vectores de ondas m y n . Cuando estos son muy grandes, aparecen oscilaciones de alta frecuencia en los integrandos de (3.18) y (3.19). Para resolver este problema hacemos un cambio de variables de manera que tras pasamos los valores de los vectores de onda m y n a los límites de integración en lugar del argumento de la función seno. Así por ejemplo la fórmula (3.18) nos queda

$$C_{k_1}(m, n) = \begin{cases} \frac{-im}{\pi^2 n} \int_0^{n\pi} \int_0^{m\pi} \frac{X \sin(X) \cos(Y)}{[X^2 + (\frac{m}{n})^2 Y^2]^{3/2}} dX dY & \text{si } m < n \\ \frac{-in^2}{\pi^2 m^2} \int_0^{n\pi} \int_0^{m\pi} \frac{X \sin(X) \cos(Y)}{[(\frac{n}{m})^2 X^2 + Y^2]^{3/2}} dX dY & \text{si } m > n \end{cases} \quad (3.20)$$

donde $X = mx$ e $Y = ny$.

Los coeficientes de la transformada de Fourier de k_1 (3.20) sólo es necesario calcularlos una vez. Por ello, dicho cálculo puede realizarse con mucha precisión utilizando un gran número de puntos en la fórmula de cuadratura, y los coeficientes obtenidos se almacenan en una matriz para usarlos cada vez que necesitemos calcular las convoluciones (3.12) y (3.13). Los correspondientes coeficientes $C_{k_2}(m, n)$ se obtienen mediante la traspuesta de esta matriz.

Otro problema que encontramos al calcular las convoluciones de los núcleos k_1 y k_2 con la función $f = N_h - N_e$ usando FFT es que, aunque el teorema de la convolución discreta [62] asume que los datos son periódicos, en realidad éstos no lo son, así que si aplicamos directamente las fórmulas (3.15) y (3.16), el resultado se verá “contaminado” debido a un solapamiento de los datos. Este fenómeno se conoce como “Aliasing” y se soluciona estableciendo una zona de “amortiguamiento”, aumentando al doble el tamaño de las matrices que contienen los datos producto de la FFT sobre N_e y N_h , y rellenando con ceros las tres cuartas partes de dicha matriz [23]. Esto es

$$\tilde{N}_{e,h} = \begin{pmatrix} 0_{N \times N} & 0_{N \times N} \\ 0_{N \times N} & \hat{N}_{e,h} \end{pmatrix}_{2N \times 2N} \quad (3.21)$$

donde $\hat{N}_{e \times N} = \mathcal{F}(N_e)$ y $\hat{N}_{h \times N} = \mathcal{F}(N_h)$.

Como consecuencia, también es necesario aumentar a $2N$ el tamaño de las matrices que contienen los valores de C_{k_1} y C_{k_2} , reordenando, en forma periódica, cada uno de sus elementos. Por ejemplo, si $c_{m,n}$ con $m, n = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$ son los valores de los elementos de la matriz C_{k_1} , la matriz periódica aumentada que aproxima el valor de \hat{k}_1 es:

$$\hat{k}_1 = \begin{pmatrix} c_{1,1} & \dots & c_{1,N/2} & c_{1,1} & c_{1,N/2} & \dots & c_{1,2} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{N/2,1} & \dots & c_{N/2,N/2} & c_{N/2,1} & c_{N/2,N/2} & \dots & c_{N/2,2} \\ c_{1,1} & \dots & c_{1,N/2} & c_{1,1} & c_{1,N/2} & \dots & c_{1,2} \\ -c_{N/2,1} & \dots & -c_{N/2,N/2} & -c_{N/2,1} & -c_{N/2,N/2} & \dots & -c_{N/2,2} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -c_{2,1} & \dots & -c_{2,N/2} & -c_{2,1} & -c_{2,N/2} & \dots & -c_{2,2} \end{pmatrix}_{2N \times 2N} \quad (3.22)$$

Volviendo a las fórmulas definidas en (3.14), como $f = N_h - N_e$ y dado que la convolución es distributiva se sigue que

$$I_1 = N_h * k_1 - N_e * k_1 \quad \text{y} \quad I_2 = N_h * k_2 - N_e * k_2 \quad (3.23)$$

Finalmente calculamos

$$\tilde{B}_{e,h} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \tilde{N}_{e,h} \cdot \hat{k}_{1,2} \right\} \quad (3.24)$$

y recuperamos los valores que nos interesan de estas convoluciones,

$$N_{e,h} * k_{1,2} = \tilde{B}_{e,h} (N + 1, \dots, 2N; N + 1, \dots, 2N) \quad (3.25)$$

Para el caso de las convoluciones $N_h * k_1$ y $N_h * k_2$, como N_h no depende de la variable temporal, su valor se calcula una sola vez. La figura 3.3 muestra la distribución espacial de estas dos convoluciones que hemos llamado E_{h_1} y E_{h_2} , respectivamente.

Por otro lado, como la distribución de la densidad de los electrones N_e , sí depende de la variable temporal, las otras dos convoluciones: $E_{e_1} = N_e * k_1$ y $E_{e_2} = N_e * k_2$, es necesario calcularlas en cada paso temporal del método numérico usado para la integración en el tiempo de las ecuaciones (3.6)-(3.8).

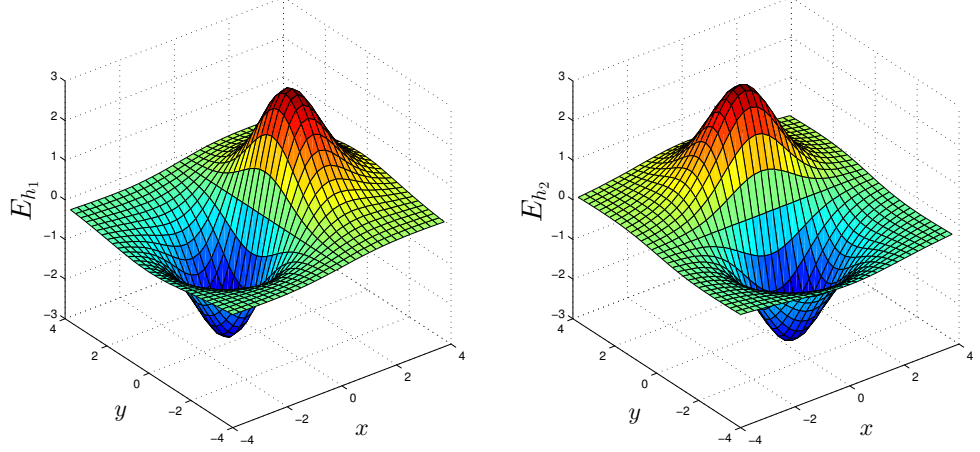


Figura 3.3: Distribución espacial de $E_{h_1} = N_h * k_1$ (izquierda) y $E_{h_2} = N_h * k_2$ (derecha).

3.3.2. Derivadas espectrales.

Las derivadas espaciales de primer orden que aparecen en el sistema de ecuaciones (3.6)-(3.8), las hemos calculado usando la diferenciación espectral con FFT de acuerdo a la fórmula (2.14).

Dada una función de dos variables $g(x, y)$, la derivada parcial espectral con respecto a x es [30]

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \Re [\mathcal{F}^{-1}\{iw\mathcal{F}(g)\}] \quad (3.26)$$

donde $w = -N/2 + 1, \dots, N/2$, es el vector de onda.

La aproximación de la derivada usando la FFT de acuerdo a la fórmula anterior es muy precisa si los datos provienen de funciones periódicas, pero como no es nuestro caso, emplearemos la derivación espectral de Chebyshev vía FFT usando la fórmula (2.23), que como su nombre indica, usa una discretización espacial sobre nodos Chebyshev. El procedimiento para calcular la derivada es el siguiente:

1. Dado un conjunto de datos g_0, \dots, g_N de la función g , evaluados sobre nodos Chebyshev $x_j = \cos(j\pi/N)$, $j = 0, \dots, N$, extendemos g de la siguiente manera

$$\tilde{g} = (g_0, g_1, \dots, g_N, g_{N-1}, \dots, g_1)$$

2. Calculamos la derivada en los nodos interiores de la discretización usando la fórmula (2.23)

$$\frac{\partial g_j}{\partial x} = -\frac{\Re[\mathcal{F}^{-1}\{iw\mathcal{F}(\tilde{g})_j\}]}{\sqrt{1-x_j^2}} \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (3.27)$$

3. Calculamos las derivadas de los extremos x_0 y x_N , usando las fórmulas

$$\frac{\partial g_0}{\partial x} = \sum_{j=0}^N j^2 \mathcal{F}(\tilde{g})_j \quad y \quad \frac{\partial g_N}{\partial x} = \sum_{j=0}^N (-1)^{j+1} j^2 \mathcal{F}(\tilde{g})_j \quad (3.28)$$

Interpolación Baricéntrica

Una vez que se han calculado las derivadas usando la derivación espectral sobre nodos Chebyshev, es necesario devolver la solución a nodos equiespaciados, ya que las convoluciones requieren que las operaciones se hagan sobre nodos equiespaciados. En ese sentido L. Trefethen [84] propone un método mucho más estable para calcular la interpolación con nodos Chebyshev, la llamada *Interpolación Baricéntrica*, que es una forma modificada de la interpolación de Lagrange [12, 83], que tiene la ventaja de que preserva la precisión espectral.

Dado un conjunto de $N+1$ nodos de interpolación x_j , $j = 0, 1, \dots, N$ y sus correspondientes valores $f_j = f(x_j)$, la fórmula baricéntrica que interpola valores a partir de x_j y f_j , en un punto x es:

$$p(x) = \frac{\sum_{j=0}^N \frac{W_j}{x - x_j} f_j}{\sum_{j=0}^N \frac{W_j}{x - x_j}} \quad (3.29)$$

donde $p(x)$ es el polinomio de interpolación sobre el punto x , y

$$W_j = \frac{1}{\prod_{k \neq j} (x_j - x_k)} \quad j = 0, \dots, N$$

son los pesos baricéntricos.

Weideman y Reddy [89] han agrupado en *A Matlab Differentiation Suite* una colección de funciones que implementan de forma optimizada tanto las derivadas espectrales, ya sea sobre nodos equiespaciados o sobre nodos

Chebyshev, como las interpolaciones necesarias para pasar de una discretización a otra. En los algoritmos que utilizamos en esta tesis hemos empleado estas funciones, lo cual nos ha permitido mejorar en gran medida el rendimiento de los mismos.

En la figura 3.4 podemos ver las derivadas parciales de primer orden de la condición inicial para la distribución de la densidad de los electrones $N_e(x, y, 0)$ con $q = 1$, esto es $\frac{\partial N_e}{\partial x}$ y $\frac{\partial N_e}{\partial y}$.

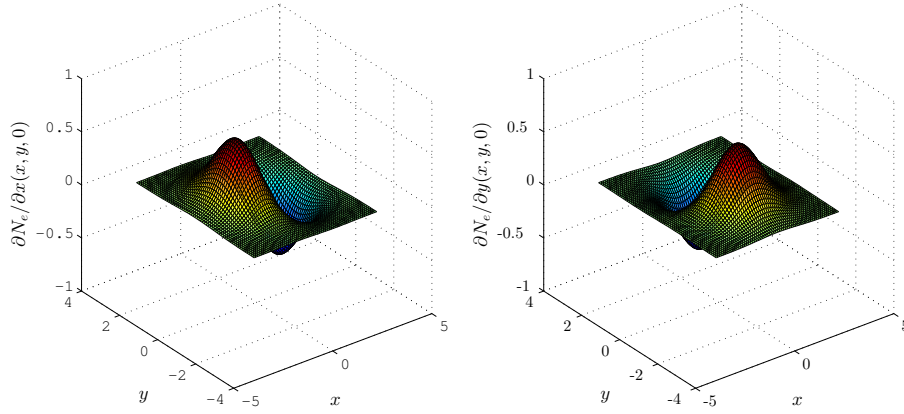


Figura 3.4: Distribución espacial de $\frac{\partial N_e(x, y, 0)}{\partial x}$ (izquierda) y $\frac{\partial N_e(x, y, 0)}{\partial y}$ (derecha) usando la diferenciación espectral de Chebyshev via FFT.

3.3.3. Esquemas numéricos para la integración de la variable temporal.

Tomando el sistema definido en (3.6)-(3.8) y despejándolo en términos de la derivada temporal, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} = -N_e \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) - u \frac{\partial N_e}{\partial x} - v \frac{\partial N_e}{\partial y} \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \left(\frac{\partial u}{\partial x} + G \right) - v \frac{\partial u}{\partial y} - aI_1 \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -v \left(\frac{\partial v}{\partial y} + G \right) - u \frac{\partial v}{\partial x} - aI_2 \quad (3.32)$$

donde $G = 1 + bN_h/q$.

En el sistema (3.30)-(3.32), todos los términos del lado derecho involucran derivadas espaciales y convoluciones, que como ya mencionamos, las hemos calculado usando métodos espectrales. De este modo, el resultado es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) para la variable temporal [23], que puede ser expresado en forma algebraica de acuerdo a (2.63), como

$$\mathbf{z}_t = F(\mathbf{z}, x, y, t) \quad (3.33)$$

donde

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} N_e \\ u \\ v \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

y $F(\mathbf{z}, x, y, t)$ corresponde al lado derecho del sistema (3.30)-(3.32).

Para resolver este sistema, hemos empleado los métodos de diferencias finitas que describimos en la sección 2.3.3 del capítulo anterior.

3.3.3.1. Método Runge-Kutta de cuarto orden.

El esquema del método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4) para la solución de la ecuación (3.33) es el siguiente

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_1 &= F(\mathbf{z}^n, t_n), \\ \mathbf{K}_2 &= F\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_1, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{K}_3 &= F\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_2, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{K}_4 &= F\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{K}_3, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{z}^{n+1} &= \mathbf{z}^n + \frac{1}{6}\Delta t [\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4] \end{aligned} \quad (3.35)$$

Como mencionamos en la sección 2.3.3 del capítulo 2, con este esquema es necesario evaluar 4 veces el lado derecho de la ecuación (3.33), lo cual se traduce en un coste computacional grande. Sin embargo, como es de autoarranque lo usaremos para inicializar el esquema semi-implícito que describiremos a continuación

3.3.3.2. Método semi-implícito.

El sistema de ecuaciones (3.33) contiene algunos términos lineales y otros no lineales. De acuerdo con Gottlieb, Orszag y Boyd [20, 42], cuando usamos un método explícito para resolver la parte temporal de una ecuación de ondas de este tipo y sobre el que hemos empleado métodos espectrales para resolver la parte espacial, estamos limitados por la condición CFL (Courant-Friedrichs-Lewy), la cual establece límites demasiado rigurosos incluso para problemas con pocos términos no lineales. Por ejemplo, para la ecuación de Burgers se tiene $\Delta t \leq O(1/N^4)$.

Para hacer menos rigurosa esta condición, usaremos el método semi-implícito Adams-Bashford 3 - Crank-Nicholson (AB3CN) que describimos en (2.70). Para aplicar este método es necesario separar la parte lineal de la no lineal en la ecuación. El esquema correspondiente a (3.33) es [48]

$$\mathbf{z}_t + L(\mathbf{z}, x, y, t) = H(\mathbf{z}, x, y, t), \quad (3.36)$$

donde L y H denotan la parte lineal y no lineal de la ecuación diferencial, respectivamente.

Luego, el esquema del método AB3CN correspondiente es [20]

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} L(\mathbf{z}^{n+1}, t^{n+1}) = \mathbf{z}^n + \Delta t \left[\frac{23}{12} H(\mathbf{z}^n, t^n) - \frac{4}{3} H(\mathbf{z}^{n-1}, t^{n-1}) + \right. \\ \left. + \frac{5}{12} H(\mathbf{z}^{n-2}, t^{n-2}) - \frac{L(\mathbf{z}^n, t^n)}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

En este esquema combinamos el método de Adams - Brashforth de tercer orden explícito sobre la parte no lineal con el esquema Crank - Nicholson implícito de segundo orden sobre la parte lineal.

La principal ventaja de este método es que como el término no lineal es tratado explícitamente, sólo es necesario resolver un sistema de ecuaciones lineales en cada paso de tiempo, a la vez que no es necesario imponer condiciones tan rigurosas para Δt . Así que llamando a la parte derecha de la ecuación anterior como RHS , y escribiendo la parte izquierda como

$$\mathbf{z}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} L(\mathbf{z}^{n+1}, t^{n+1}) = A \mathbf{z}^{n+1}, \quad (3.38)$$

donde $A = I + \frac{\Delta t}{2} L$ es un operador lineal, se obtiene el siguiente esquema para el método semi-implícito

$$\mathbf{z}^{n+1} = A^{-1} RHS \quad (3.39)$$

donde

$$RHS = \mathbf{z}^n + \Delta t \left[\frac{23}{12}H(\mathbf{z}^n, t^n) - \frac{4}{3}H(\mathbf{z}^{n-1}, t^{n-1}) + \frac{5}{12}H(\mathbf{z}^{n-2}, t^{n-2}) + \frac{L(\mathbf{z}^n, t^n)}{2} \right].$$

Para aplicar el esquema semi-implícito a cada una de las ecuaciones del sistema (3.30)-(3.32), las escribimos en la forma (3.36), esto es

$$N_{e_t} = -(u_x + v_y)N_e - uN_{e_x} - vN_{e_y} \quad (3.40)$$

$$u_t + Gu = -uu_x - vu_y + aI_1 \quad (3.41)$$

$$v_t + Gv = -uv_x - vv_y + aI_2 \quad (3.42)$$

Nótese que ahora todos los términos lineales del sistema están en el lado izquierdo y los no lineales en el lado derecho. El miembro izquierdo de la ecuación para N_e no tiene un término lineal L , mientras que para u y v los términos lineales son Gu y Gv .

Por otro lado, al término no lineal del lado derecho de la ecuación para N_e lo denominamos $H_{N_e} = -(u_x + v_y)N_e - uN_{e_x} - vN_{e_y}$, mientras que para u y v podemos escribir su lado derecho también como operadores, esto es

$$H_u = -uu_x - vu_y + aI_1$$

$$H_v = -uv_x - vv_y + aI_2$$

Por lo tanto el sistema (3.40)-(3.42) nos queda

$$N_{e_t} = H_{N_e} \quad (3.43)$$

$$u_t + Gu = H_u \quad (3.44)$$

$$v_t + Gv = H_v \quad (3.45)$$

El esquema semi-implícito correspondiente a este sistema es:

$$N_e^{n+1} = N_e^n + \Delta t \left[\frac{23}{12}H_{N_e}(N_e^n) - \frac{4}{3}H_{N_e}(N_e^{n-1}) + \frac{5}{12}H_{N_e}(N_e^{n-2}) \right] \quad (3.46)$$

$$u^{n+1} + \frac{\Delta}{2}Gu^{n+1} = u^n + \Delta t \left[\frac{23}{12}H_u(u^n) - \frac{4}{3}H_u(u^{n-1}) + \frac{5}{12}H_u(u^{n-2}) - \frac{1}{2}Gu^n \right] \quad (3.47)$$

$$v^{n+1} + \frac{\Delta}{2}Gv^{n+1} = v^n + \Delta t \left[\frac{23}{12}H_v(v^n) - \frac{4}{3}H_v(v^{n-1}) + \frac{5}{12}H_v(v^{n-2}) - \frac{1}{2}Gv^n \right] \quad (3.48)$$

Nótese que dado que la ecuación (3.40) no tiene parte lineal, solo aplicamos el método de Adams-Bashforth de tercer orden en el miembro derecho. Luego de acuerdo a (3.39) se tiene que

$$u^{n+1} = A^{-1} RHS_u \quad (3.49)$$

$$v^{n+1} = A^{-1} RHS_v \quad (3.50)$$

donde

$$RHS_u = u^n + \Delta t \left[\frac{23}{12} H_u(u^n) - \frac{4}{3} H_u(u^{n-1}) + \frac{5}{12} H_u(u^{n-2}) - \frac{1}{2} G u^n \right]$$

y

$$RHS_v = v^n + \Delta t \left[\frac{23}{12} H_v(v^n) - \frac{4}{3} H_v(v^{n-1}) + \frac{5}{12} H_v(v^{n-2}) - \frac{1}{2} G v^n \right]$$

Para calcular la solución del esquema (3.46)-(3.48) en el paso de tiempo n es necesario conocer la solución en los pasos de tiempo $n-1$ y $n-2$. Para inicializar el método hemos usado el esquema de Runge-Kutta de cuarto orden de acuerdo con (3.35), para calcular estos dos primeros pasos. En ese sentido obtenemos suficiente precisión al inicio y no perdemos el orden de convergencia del método.

3.4. Resultados numéricos.

Como un primer experimento numérico, hemos resuelto el caso descrito en [1]. Usando los parámetros físicos listados en la tabla 3.1, los parámetros adimensionales (3.9) toman los valores $a = 0.00235$, $b = 0.5333$. Como condiciones iniciales para la distribución de la densidad de electrones y las componentes de la velocidad hemos tomado, respectivamente: $N_e(x, y, 0) = q e^{-(x^2+y^2)/2}$, $u(x, y, 0) = 0.032 (U_0 = 4 \times 10^5 \text{ ms}^{-1})$ y $v(x, y, 0) = 0$, con $q = 1, 4$ y 16 pozos. El tamaño característico de la mancha es $\Lambda = 10^{-6} \text{ m}$ y el dominio de integración en variables adimensionales es $D = [-4, 4] \times [-4, 4]$. También probamos diferentes números de nodos de la discretización espacial ($N = 2^n$ con $n = 5, 6, 7$).

Método de Euler explícito.

Con objeto de comprobar la eficacia de los métodos espectrales y como una primera aproximación que nos permita estudiar los patrones de las soluciones del sistema, usamos un esquema de Euler explícito. La figura 3.5

muestra la condición inicial para la distribución de la densidad de electrones y las correspondientes velocidades u y v . Posteriormente en la figura 3.6 podemos observar soluciones para $t = 80$ fs. Sin embargo, este método requiere que usemos pasos de tiempo muy pequeños lo cual produce un coste computacional muy alto, aparte de que el número de iteraciones es muy grande y el error de truncamiento hace que el sistema se desestabilice. En la figura 3.7 se muestra este comportamiento para $t = 1.3$ ps, con lo cual esta implementación no nos permite simular soluciones para tiempos comparables con los casos resueltos en [1, 2].

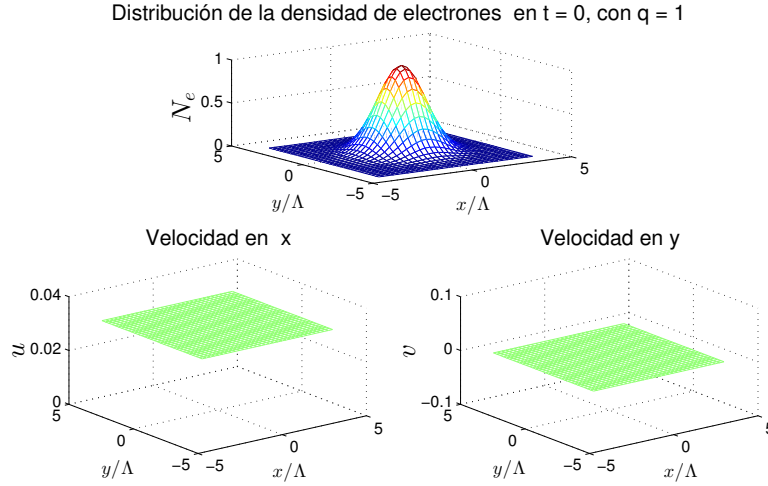


Figura 3.5: Condiciones iniciales del sistema (3.30)-(3.32), $N_e(x, y, 0) = qe^{-(x^2+y^2)/2}$, $u(x, y, 0) = 0.032$, $v(x, y, 0) = 0$, con $q = 1$

Esquema semi-implícito (3.46)-(3.48).

Con este esquema, aparte de que aumentamos el orden de aproximación, el coste computacional es significativamente mucho menor debido a que no es necesario tomar pasos de tiempo Δt demasiado pequeños. Las figuras 3.8 y 3.9 muestran soluciones del sistema para $q = 1$ y $q = 4$ en $t = 1.5$ ps. Posteriormente la figura 3.10 muestra la solución con $q = 16$ para $t = 2.0$ ps, que es el tiempo máximo al que se llega en los experimentos numéricos de [1] y [2]. Usando el método semi-implícito para la integración de la variable temporal hemos podido llegar incluso a tiempos muy largos ($t > 5$ ps), en un tiempo de cómputo relativamente corto (aproximadamente media hora para

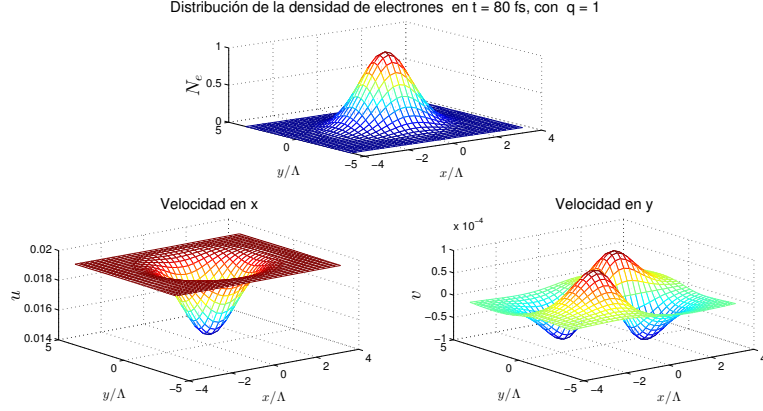


Figura 3.6: $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), en $t = 80$ fs.

alcanzar $t > 5$ ps).

Nótese cómo la distribución de la densidad de los electrones N_e se conserva conforme avanza el tiempo, mientras que las componentes de las velocidades u y v tienden a cero muy lentamente.

Con objeto de verificar la precisión que se obtiene al resolver el sistema de ecuaciones que describen el modelo (3.1)-(3.2), mediante métodos espectrales, hemos reproducido algunas figuras que aparecen en el artículo [1], usando para ello los datos obtenidos con nuestro método numérico. La figura 3.11 muestra los perfiles de $(N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0))$ en $t = 80$ fs (columna izquierda) y en $t = 1.5$ ps (columna derecha), con $q = 1$ (primera fila) y $q = 16$ (segunda fila). Esta figura guarda una alta concordancia, no solo cualitativa sino también cuantitativa, con la correspondiente figura 2 que aparece en [1]. Incluso, los patrones que se observan en nuestra figura son mucho más suaves y definidos que los que se pueden ver en dicho artículo.

Nótese que para $t = 80$ fs (columna izquierda), los patrones que describen $(N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0))$ para $q = 1$ y $q = 16$ pozos, son relativamente similares, mientras que para $t = 1.5$ ps (columna derecha), la forma de dos gajos que presenta el caso con $q = 16$ pozos (abajo) es más amplio que su correspondiente con $q = 1$ pozo.

Por otro lado, en la figura 3.12 se aprecia el desplazamiento medio de la

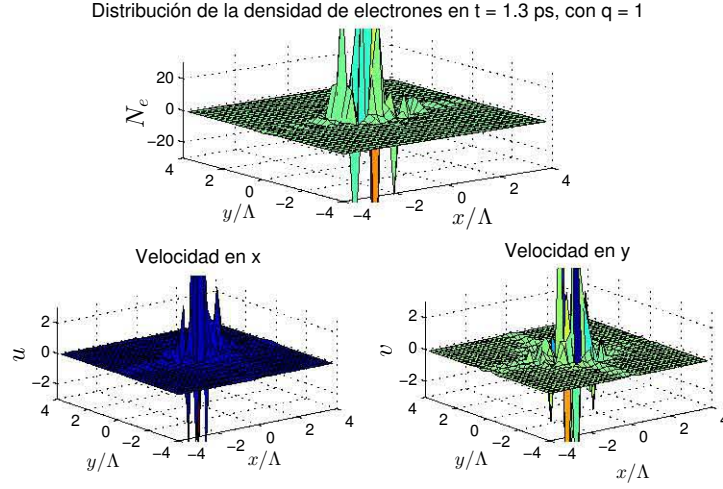


Figura 3.7: $N(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 1$ en $t = 1.3$ ps.

distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$, definido como

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{N_t} \int x N_e(r, t) dx dy, \quad N_t = \int N_e(r, t) dx dy \quad (3.51)$$

desde $t = 0$ hasta $t = 2.0$ ps, para tres casos:

- $q = 4$; $\tau_{eh} = 50$ fs (línea continua negra),
- $q = 4$; $\tau_{eh} = 150$ fs (línea continua azul) y
- $q = 16$; $\tau_{eh} = 150$ fs (línea continua roja).

También aparecen en esta figura, las correspondientes curvas de la aproximación de la mancha compacta (rigid spot approximation)

$$\langle x_{rsa} \rangle = U_0 \exp(-\gamma t) \sinh(\gamma_{pl} t) / \gamma_{pl}, \quad (3.52)$$

donde $2\gamma = 1/\tau_e + 1/2\tau_{eh}$ y $\gamma_{pl} = \gamma^2 - \Omega_{pl}^2$ (líneas discontinuas). Esta figura también guarda una alta concordancia con la correspondiente figura 4 de [1]. En ella podemos apreciar cómo, para un tiempo corto ($t < 0.2$ ps), $\langle x(t) \rangle$ se mueve muy rápido, mientras que para tiempos largos la velocidad del desplazamiento tiende a ser constante. Este es el mismo comportamiento que se puede ver en la figura 4 del artículo [1].

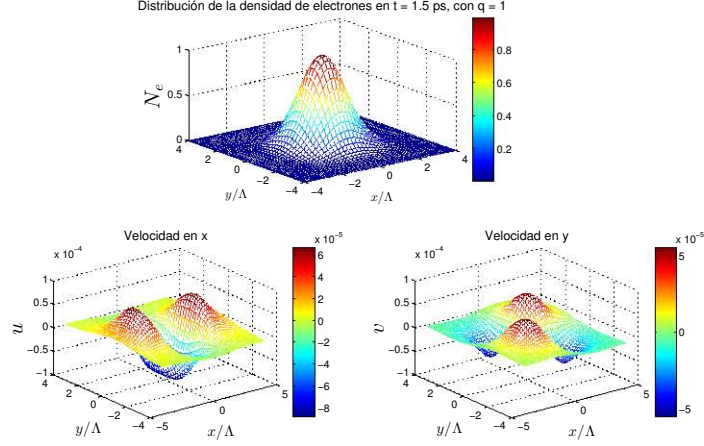


Figura 3.8: $N(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 1$ en $t = 1.5$ ps.

Una ventaja que tenemos al usar métodos espectrales es poder llegar a tiempos relativamente largos ($t > 2.0$ ps). En la figura 3.13 se muestra la solución del sistema para $t = 4.0$ ps con $q = 1$ pozo. Nótese que el patrón que presenta $(N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0))$ es muy parecido al caso con $q = 16$ pozos para $t = 1.5$ ps de la figura 3.11, lo que indica que ambas soluciones tienden a un mismo perfil para tiempos largos.

3.4.1. Análisis del modelo sin fricción.

Un límite muy interesante lo constituye el caso en el que el tiempo de relajación τ_e tiende a infinito. En este límite sólo hay que tener en cuenta el término de arrastre y se corresponde al caso de una muestra sin impurezas y con energías demasiado bajas para la emisión interna de fotones. Este límite fue analizado por Sherman *et al.* [76] mediante un desarrollo en funciones Hermite-Gauss pero sin incluir el término no lineal $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ de la ecuación (3.2). En este caso, la adimensionalización que usamos en la sección (3.2.1) ya no es válida, puesto que no podemos usar a τ_e como valor característico. En su lugar, usamos el inverso de la frecuencia característica del plasma Ω_{pl}^{-1} que, de acuerdo con [1], su valor es $\Omega_{pl}^{-1} = 1.4$ ps. Por lo tanto los valores característicos del tiempo y la velocidad serán

$$[t] = \Omega_{pl}^{-1} \quad \text{y} \quad [u] = [v] = \Lambda / \Omega_{pl}^{-1} = 7.143 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$$

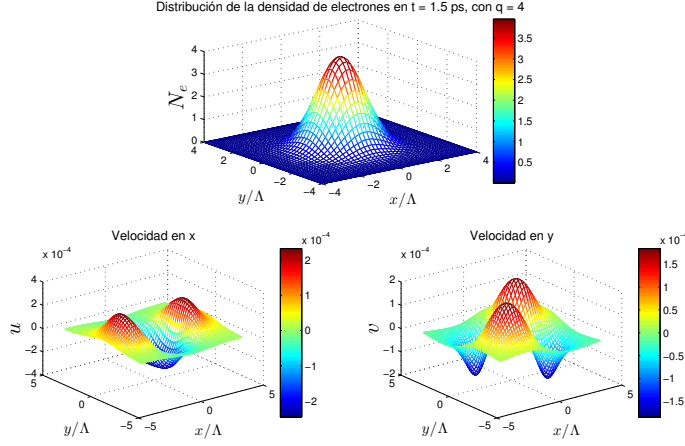


Figura 3.9: $N(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 4$ en $t = 1.5$ ps.

Suponiendo ahora que $\tau_e \rightarrow \infty$, las ecuaciones adimensionales (3.7) y (3.8), para las componentes x e y de la velocidad, quedan:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{4}{\pi^{3/2}} \iint_D \frac{(N_h - N_e)(x - x')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - u(b_\infty N_h/q),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{4}{\pi^{3/2}} \iint_D \frac{(N_h - N_e)(y - y')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - v(b_\infty N_h/q),$$

donde

$$b_\infty = \frac{\Omega_{pl}^{-1}}{\tau_{eh}}$$

Para resolver este caso también hemos usado el esquema semi-implícito (3.46)-(3.48), solo que el coeficiente del término lineal ahora es $G = bN_h/q$. Con esta nueva definición de las variables adimensionales, la velocidad inicial u_0 no aparece en ninguna de las constantes adimensionales. En ese sentido, podemos usar la velocidad inicial como un parámetro libre para analizar el comportamiento de la solución.

Por ejemplo, en el caso $\tau_{eh} = 1.5$ ps ($b_\infty = 0.9333$) y velocidad inicial $U_0 = 4 \times 10^5 \text{ms}^{-1}$ ($u(x, y, 0) = 0.56$), la solución numérica crece rápidamente y se vuelve inestable en un tiempo corto. Mientras que si hacemos decrecer la

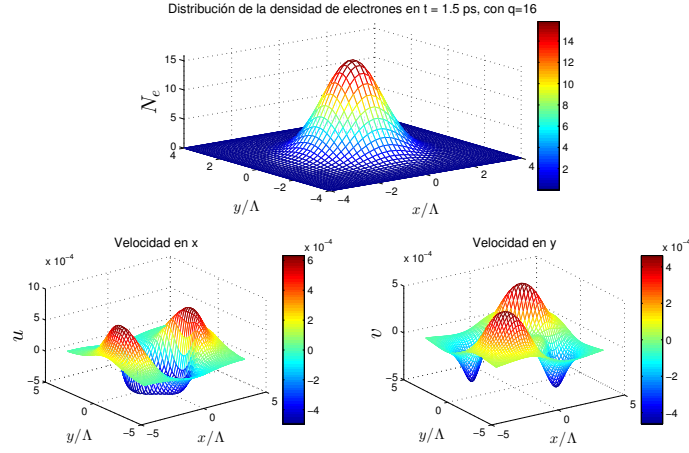


Figura 3.10: $N_e(x, y, t)$ (arriba), $u(x, y, t)$ (izquierda) y $v(x, y, t)$ (derecha), con $q = 16$ en $t = 2.0$ ps.

velocidad inicial en un orden de magnitud ($0.1u(x, y, 0)$), podemos obtener soluciones numéricas estables para tiempos superiores a 6.27 ps. La figura 3.14 muestra un patrón muy parecido al que se puede ver en la figura 2 del artículo de Sherman *et al.* del 2009 [76], para $t = 6.27$ ps. En la figura 3.15 se puede observar el patrón correspondiente a la componente de la velocidad u . De hecho, si utilizamos los mismos parámetros que en [76] ($b_\infty = 4$ y $b_\infty = 1/16$) la solución para $t = 0.45$ ps coincide con la que se muestra en la figura 2 de dicho artículo, tal y como se aprecia en la figura 3.16.

Disminuyendo aún más la velocidad inicial e incrementando el número de puntos en la discretización espacial ($N = 2^7$), es posible llegar a tiempos más largos ($t > 14$ ps). Las figuras 3.17 y 3.18 muestran los patrones de $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ y u , respectivamente, para $t = 14$ ps, tomando como velocidad inicial adimensional $0.01u(x, y, 0)$.

Un hecho interesante que observamos en [76] es la proporcionalidad del desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$ en U_0 , no solo para tiempos cortos, cuando $\langle x(t) \rangle = U_0 t$, sino también para tiempos posteriores. La figura 3.19 corrobora esta observación sobre la universalidad del desplazamiento medio. Esta figura muestra que $\langle x(t) \rangle \Omega_{pl}/U_0$ es independiente del valor de la velocidad inicial U_0 para todos los tiempos. También hemos observado que esta universalidad es aplicable incluso a la solución del modelo completo (3.30)-(3.32), cuando se supone que τ_e es finito.

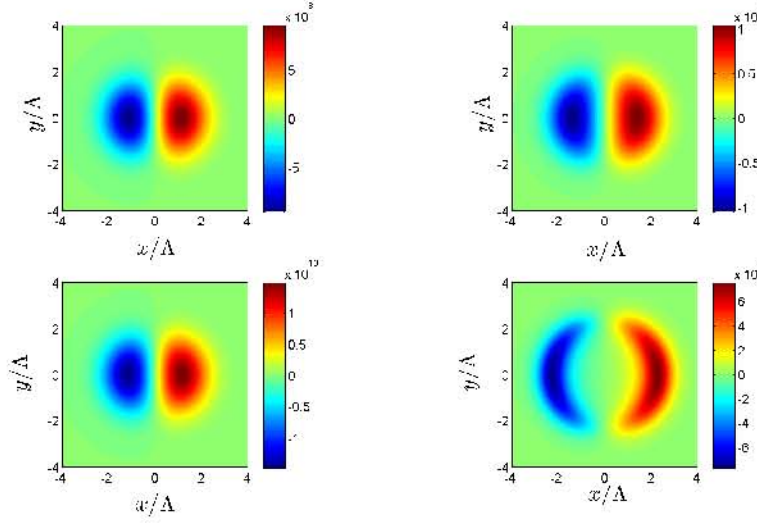


Figura 3.11: Cambio en la distribución de la densidad de electrones $N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0)$ en $t = 80$ fs (columna izquierda) y en $t = 1.5$ ps (columna derecha), con $q = 1$ (primera fila) y $q = 16$ (segunda fila). Esta figura es comparable con la figura 2 de [1].

3.5. Conclusiones.

En este capítulo hemos resuelto el modelo hidrodinámico bidimensional que describe la dinámica de las corrientes generadas en los dispositivos MQW mediante inyección óptica, usando métodos espectrales para calcular las derivadas espaciales y para resolver las convoluciones resultantes de las integrales que definen el campo eléctrico de Coulomb.

El uso de métodos espectrales para la resolución del problema espacial del modelo, proporciona una alta precisión en las soluciones y un coste computacional bajo.

Para resolver las convoluciones, debido a que las mismas poseen núcleos singulares y que decaen muy lentamente, calculamos los coeficientes de la transformada de Fourier de una forma muy precisa, eludiendo de esta manera la singularidad de las mismas y ahorrando tiempo de cómputo. Para calcular las convoluciones hemos completado con ceros las matrices que contienen las

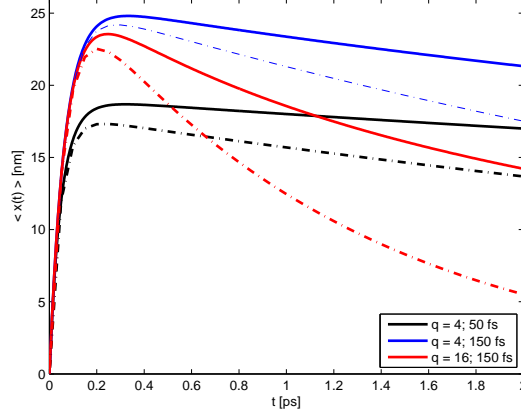


Figura 3.12: Desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$, definido en (3.51), con $q = 4$; $\tau_{eh} = 50\text{fs}$, $q = 4$; $\tau_{eh} = 150\text{fs}$ y $q = 16$; $\tau_{eh} = 150\text{fs}$. Esta figura es comparable con la figura 4 de [1].

transformadas de Fourier discretas, a fin de crear una zona de amortiguamiento que nos permitiera evitar el solapamiento de los datos debido a que los núcleos de las convoluciones no son periódicos.

Para la integración temporal hemos usado el método semi-implícito AB3CN, en el que la parte lineal del problema es tratada con un método implícito mientras que la parte no lineal se resuelve explícitamente, logrando así evitar los problemas que causan este tipo de modelos que contienen términos altamente no lineales y que obligan a imponer pasos de tiempo demasiado pequeños.

Los resultados obtenidos son muy acordes con los obtenidos por Sherman *et al.* mediante su aproximación sobre una base finita de tipo Hermite-Gauss. El método de resolución que planteamos es suficientemente estable y robusto, permitiéndonos no solo calcular soluciones para tiempos largos, sino también estudiar casos de límites distinguidos tales como el que presentamos haciendo crecer el tiempo de relajación de los electrones $\tau_e \rightarrow \infty$ y también los que analizaremos en el próximo capítulo.

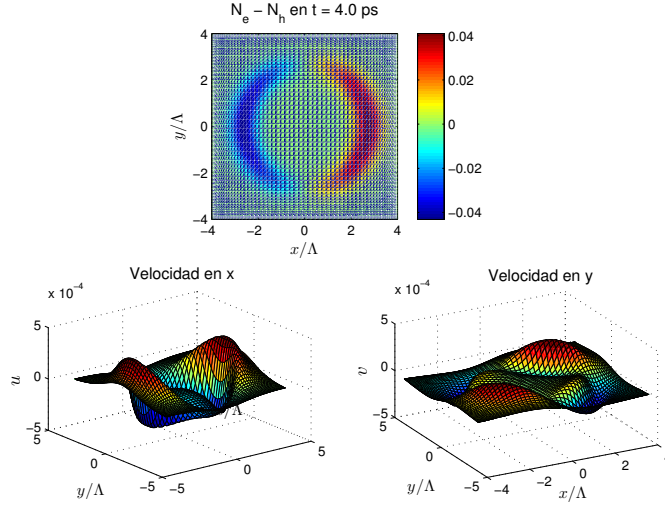


Figura 3.13: $(N_e(x, y, t) - N_e(x, y, 0))$ (arriba), u (abajo izquierda) y v (abajo derecha) en $t = 4.0$ ps

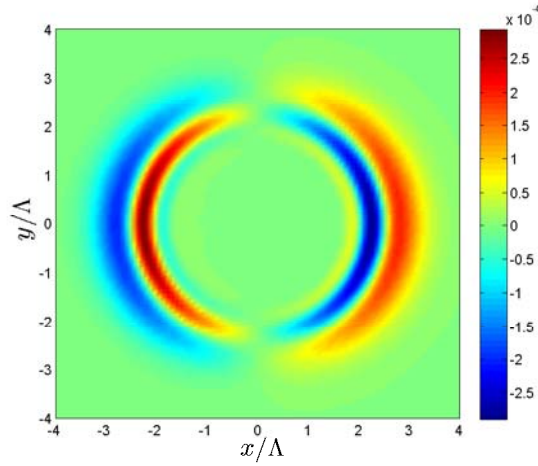


Figura 3.14: $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ en $t = 6.27$ ps con velocidad inicial $0.1u(x, y, 0)$. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].

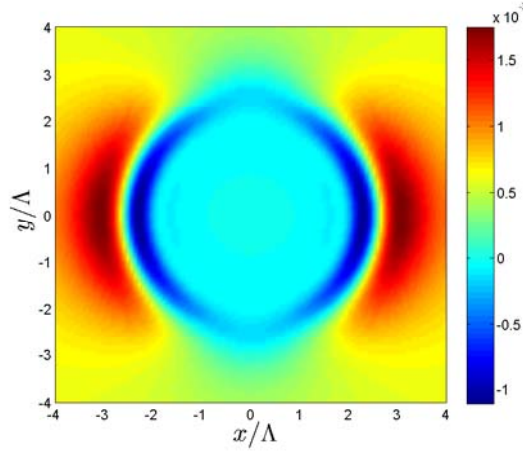


Figura 3.15: $u(x, y, t)$ en $t = 6.27$ ps con velocidad inicial $0.1u(x, y, 0)$. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].

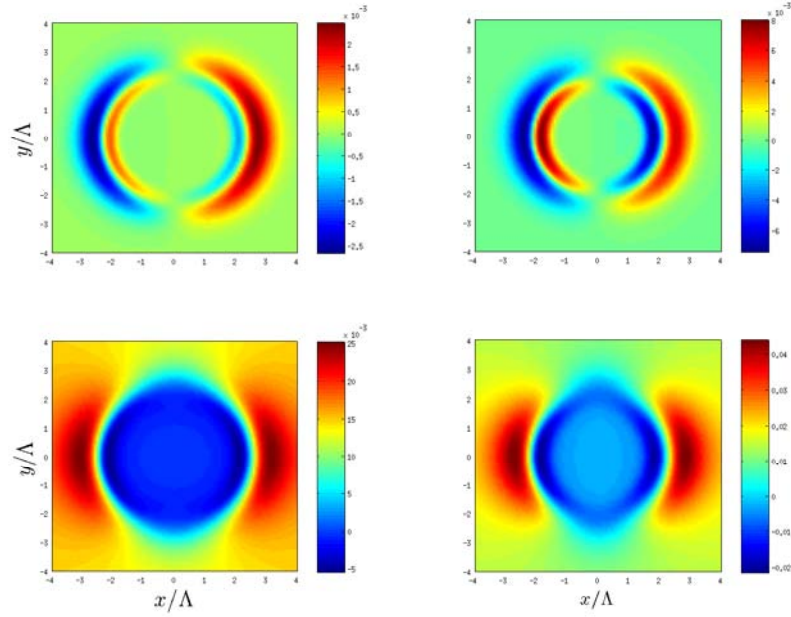


Figura 3.16: $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ (primera fila) y $u(x, y, t)$ (segunda fila) para $b_\infty = 4$ (columna izquierda) y $b_\infty = 1/16$ (columna derecha) en $t = 0.45$ ps. Esta figura es comparable con la figura 2 de [76].

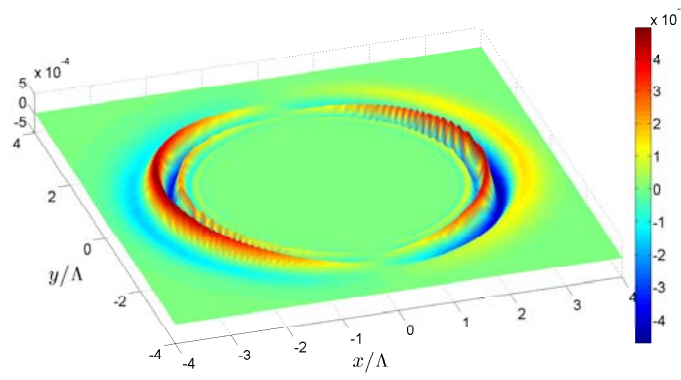


Figura 3.17: Gráfica de $N_e(x, y, t) - N_h(x, y)$ en $t = 14$ ps con velocidad inicial $0.01u(x, y, 0)$.

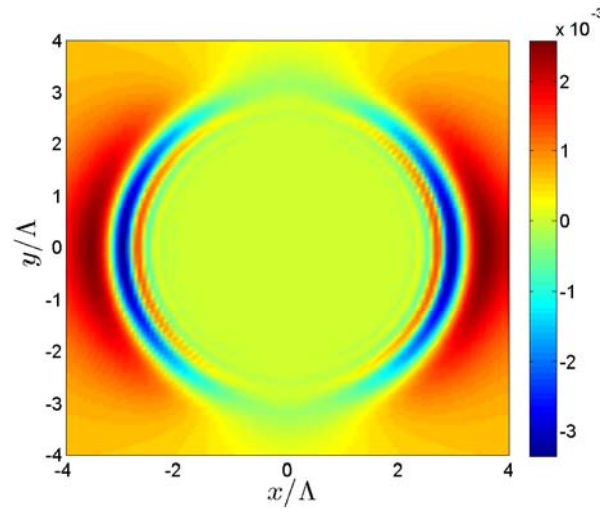


Figura 3.18: $u(x, y, t)$ en $t = 14$ ps con velocidad inicial $0.01u(x, y, 0)$.

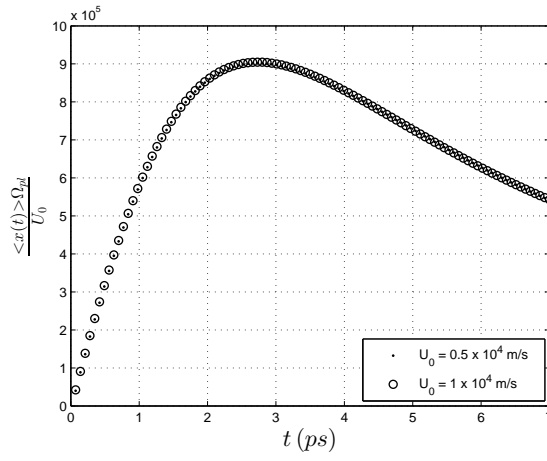


Figura 3.19: Desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$ definido en (3.51) para el caso $\tau_{eh} = 1.5$ ps ($b_\infty = 0.9333$).

Capítulo 4

Efectos del campo magnético en la dinámica de corrientes inyectadas ópticamente.

4.1. Introducción.

En este capítulo extendemos el modelo (3.1)-(3.2) asumiendo que existe un campo magnético adicional \mathbf{H} a lo largo del eje z . La influencia de este campo magnético se representa mediante la adición de la *Fuerza de Lorentz* en el lado derecho de la ecuación de la velocidad (3.2). El único estudio conocido sobre la influencia de un campo magnético en la inyección óptica de dispositivos de pozos cuánticos es el realizado por K.M. Rao y J.E. Sipe [66], de manera que ésta será la primera vez que se hace una simulación numérica de éste fenómeno.

En presencia de un campo magnético perpendicular a la dirección de movimiento de las partículas cargadas, éstas describen un movimiento circular. La frecuencia a la cual se mueven las mismas se conoce como *Frecuencia del Ciclotrón*, mientras que el radio de la circunferencia que describen se conoce como *Radio del Ciclotrón*.

Una forma de verificar si la solución numérica del modelo bidimensional de la dinámica de las corrientes ópticamente inyectadas, bajo la influencia de un campo magnético, sigue el comportamiento típico del fenómeno físico, es calculando el radio y la frecuencia de dicho ciclotrón a partir de los datos obtenidos de las simulaciones numéricas. En este capítulo comprobaremos que, efectivamente, los resultados numéricos concuerdan con los teóricos.

Para lograr esto, al igual que en el capítulo anterior, resolvemos numéricamente el modelo (3.1)-(3.2) usando métodos espectrales para resolver la parte espacial del problema y el método semi-implícito (AB3CN) para la integración de la variable temporal.

Para estudiar la influencia del campo magnético sobre el modelo, analizamos tres casos: el primer caso consiste en hacer crecer los tiempos de relajación a la vez que quitamos la fuerza de Coulomb. De esta forma analizamos el efecto de aplicar únicamente el campo magnético. Los datos obtenidos de la solución numérica de este caso, nos permitirán calcular la frecuencia y el radio del ciclotrón. En el segundo caso analizamos la dinámica que se obtiene de la interacción de la fuerza de Coulomb con el campo magnético y finalmente en el tercer caso estudiamos los patrones que se obtienen de la solución del modelo completo bajo la influencia del campo magnético.

Al quitarle términos al modelo, las soluciones presentan patrones complejos que provocan que el esquema numérico se vuelva inestable. Sin embargo, hemos podido modificar los esquemas numéricos para poder obtener soluciones para tiempos largos, en todos los casos. Los resultados que obtenemos en cada caso están determinados por la intensidad del campo magnético y la velocidad inicial aplicada.

El estudio del modelo, que contiene la influencia del campo magnético, lo completamos incluyendo un análisis espectral del desplazamiento medio de los electrones en las direcciones horizontal y vertical.

4.1.1. Organización del capítulo.

Este capítulo está organizado del siguiente modo:

En la sección 4.2 se presentan las ecuaciones del modelo 2D extendido mediante la incorporación del campo magnético a la ecuación de la velocidad y la deducción de las ecuaciones adimensionales correspondientes. En la sección 4.3 se explican brevemente los métodos numéricos utilizados en la resolución del modelo. En la sección 4.4 se hace un análisis de tres casos para estudiar el efecto que provoca el campo magnético en la dinámica del sistema. Asimismo comprobamos, usando los datos de la solución numérica del caso más simple, que la frecuencia y el radio del ciclotrón concuerdan con los valores teóricos. En la sección 4.5 se hace un análisis espectral del desplazamiento medio de los electrones. Finalmente en la sección 4.6 se exponen las conclusiones del capítulo.

4.2. Ecuaciones del modelo con campo magnético.

Tomando como base el modelo bidimensional para las corrientes inyectadas (3.1)-(3.2), que resolvimos en el capítulo anterior, añadimos la fuerza de Lorentz \mathbf{F}_L al lado derecho de la ecuación (3.2). La Fuerza de Lorentz resultante de aplicar un campo magnético \mathbf{H} en la dirección del eje z se define en el sistema internacional (SI) como [94]

$$\mathbf{F}_L = e(\mathbf{u} \times \mathbf{H}), \quad (4.1)$$

donde la unidad de medida del campo magnético \mathbf{H} es el Tesla (T).

Si incorporamos la fuerza de Lorentz a la ecuación de la velocidad para el modelo hidrodinámico 2D, el modelo extendido de la dinámica de las corrientes ópticamente inyectadas que incorpora la influencia del campo magnético será

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} + \nabla(N_e \mathbf{u}) = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{e\mathbf{E}}{m_e} - \frac{\mathbf{u}}{\tau_{eh}} \frac{N_h}{N_0} - \frac{\mathbf{u}}{\tau_e} + \frac{\mathbf{F}_L}{m_e}. \quad (4.3)$$

Tomando en cuenta que la velocidad media local \mathbf{u} está descrita en términos de sus componentes x e y , por

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y, t) = u(x, y, t)\mathbf{i} + v(x, y, t)\mathbf{j} + 0\mathbf{k},$$

y el campo magnético es perpendicular a la velocidad, ya que es aplicado a lo largo del eje z , también se tiene que

$$\mathbf{H} = 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + H\mathbf{k}.$$

Luego, de acuerdo a la fórmula (4.1) obtenemos

$$\mathbf{F}_L = e(vH)\mathbf{i} - e(uH)\mathbf{j} + 0\mathbf{k} \quad (4.4)$$

Así que, de acuerdo con (4.3), las componentes de la fuerza de Lorentz en las direcciones x e y son respectivamente

$$\frac{F_{L,x}}{m_e} = \frac{e}{m_e} vH \quad (4.5)$$

$$\frac{F_{L,y}}{m_e} = -\frac{e}{m_e} uH \quad (4.6)$$

4.2.1. Ecuaciones adimensionales.

Usando los mismos valores característicos del modelo 2D de la tabla 3.1, definimos el correspondiente al campo magnético como

$$[H] = \frac{m_e}{e\tau_e} \quad (4.7)$$

Definiendo ahora H_{SD} como la variable adimensional para el campo magnético tenemos que

$$H_{SD} = \frac{H}{[H]} = 0.21H \quad \text{con } H \in \{1, 2, \dots, 20\} \text{ Tesla.} \quad (4.8)$$

Por tanto, de (4.3) se tiene que las ecuaciones adimensionales de las componentes de las velocidades u y v que incorporan la fuerza de Lorentz son

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = & -a \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(x - x')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - \\ & - u(1 + bN_h/q) + vH_{SD}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = & -a \int \int_D \frac{(N_h - N_e)(y - y')}{((x - x')^2 + (y - y')^2)^{3/2}} dx' dy' - \\ & - v(1 + bN_h/q) - uH_{SD} \end{aligned} \quad (4.10)$$

En la solución del modelo 2D vimos que las integrales que aparecen en las dos ecuaciones anteriores se pueden resolver mediante una convolución, por lo tanto las ecuaciones adimensionales correspondientes al modelo (4.2)-(4.3) que incluye la influencia del campo magnético se pueden reescribir de la siguiente manera

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} + \frac{\partial(N_e u)}{\partial x} + \frac{\partial(N_e v)}{\partial y} = 0, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -aI_1 - u(1 + bN_h/q) + vH_{SD}, \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -aI_2 - v(1 + bN_h/q) - uH_{SD} \quad (4.13)$$

donde $I_1 = N_h * k_1 - N_e * k_1$, $I_2 = N_h * k_2 - N_e * k_2$ y $H_{SD} = 0.21H$, con $H \in \{1, 2, \dots, 20\}$ Tesla.

4.3. Esquemas numéricos.

Al igual que en el capítulo anterior, para resolver el modelo (4.2)-(4.3), hemos usado métodos espectrales para resolver las derivadas espaciales y las convoluciones. Como veremos en la siguiente sección, en algunos casos, debido al comportamiento de las soluciones para la velocidad, se han calculado las derivadas espectrales usando una discretización sobre nodos equiespaciados de acuerdo a la fórmula (2.14), mientras que en otros se ha usado la derivación espectral de Chebyshev de acuerdo con (2.20). Los métodos para la integración de la variable temporal también son los mismos que usamos en el capítulo 3, es decir usamos un método semi-implícito AB3CN y el esquema de Runge-Kutta de cuarto orden para inicializar el método AB3CN.

4.4. Análisis y resultados.

En esta sección haremos un análisis numérico del comportamiento del modelo (4.2)-(4.3). Para hacer este análisis, al igual que en el capítulo 3, calculamos el cambio en la distribución de la densidad de los electrones, $N_e(\mathbf{r}, t) - N_e(\mathbf{r}, 0) = N_e(\mathbf{r}, t) - N_h(\mathbf{r}) = N_e - N_h$ y la velocidad local $\mathbf{u} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j}$. En nuestro análisis tenemos en cuenta dos parámetros: la intensidad del campo magnético y la velocidad inicial.

Analizaremos tres casos para el modelo. En cada caso describimos, en primer lugar, los ajustes necesarios en la adimensionalización y en los esquemas numéricos y luego presentamos los perfiles de las soluciones numéricas que se obtienen variando la intensidad del campo magnético y la velocidad inicial.

4.4.1. Caso solamente con la fuerza de Lorentz.

Este es el caso más sencillo de modelo (4.2)-(4.3). Este caso se obtiene haciendo crecer los tiempos de relajación τ_e y τ_{eh} y quitando la fuerza de Coulomb. Por lo tanto, la ecuación (4.3) nos queda

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{\mathbf{F}_L}{m_e} \quad (4.14)$$

Dado que los tiempos de relajación ya no aparecen en la ecuación (4.14), es necesario volver a adimensionalizarla. Para ello usamos de nuevo el inverso de la frecuencia del plasma $\Omega_{pl}^{-1} = 1.4 \text{ ps}$ [1]. Redefiniendo las variables adimensionales para el tiempo, la velocidad y el campo magnético como:

$[t] = \Omega_{pl}^{-1}$, $[u] = [v] = \Lambda/\Omega_{pl}^{-1}$ y $[H] = m_e/e\Omega_{pl}^{-1}$ (el resto de las variables adimensionales permanecen iguales al caso general del modelo 2D) y sustituyéndolas en (4.14), obtenemos las ecuaciones sin dimensiones para las velocidades en las direcciones x e y , esto es

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = v H_{SD}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -u H_{SD}, \quad (4.16)$$

donde $H_{SD} = H/[H] = 3.6745H$, $H \in \{1, \dots, 20\}$ Tesla.

Reescribiendo las ecuaciones (4.15) y (4.16) en la forma (2.70) se obtiene

$$u_t = -uu_x - vv_y + vH_{SD}, \quad (4.17)$$

$$v_t = -uv_x - vv_y - uH_{SD}. \quad (4.18)$$

En este caso utilizaremos el método AB3 para realizar la integración temporal del modelo.

En cuanto a la solución de la parte espacial del problema, utilizamos métodos espectrales. Sin embargo, tal y como se observa en la figura 4.1, las componentes de la velocidad u y v presentan perfiles que son constantes espacialmente, por lo que no es necesario usar la derivación espectral sobre nodos Chebyshev que usabamos en el capítulo 3. Para este caso usamos la derivación espectral sobre nodos equiespaciados definida en (2.14), con la que se obtiene igualmente una precisión espectral. Una de las razones que nos ha motivado el estudio de este caso es calcular la frecuencia y el radio del ciclotrón a partir de los datos obtenidos de la simulación numérica. y compararlo con los resultados teóricos. Esto nos dará un buen indicio de la precisión del método.

Tomando un campo magnético fijo de $H = 1$ T y un número de nodos de la discretización espacial $N = 2^7$, hemos podido observar que el radio de rotación de la distribución de la densidad de los electrones N_e , depende de la velocidad inicial aplicada. Para una velocidad inicial $u_0 = 10^4 \text{ ms}^{-1}$, el radio es muy pequeño, mientras que para una velocidad inicial mayor $u_0 = 10^6 \text{ ms}^{-1}$, el radio de rotación es mucho mayor. Esto se puede apreciar comparando los contornos de N_e en las figuras 4.1 y 4.2 (gráfica superior izquierda). En la figura 4.1, el contorno de N_e está centrado muy cerca del origen, mientras que en la figura 4.2 las circunferencias que conforman el contorno están desplazadas hacia abajo. En todos los casos, las componentes de la velocidad en

las direcciones x e y oscilan en el tiempo con valores en el intervalo $[-u_0, u_0]$ y son constantes espacialmente.

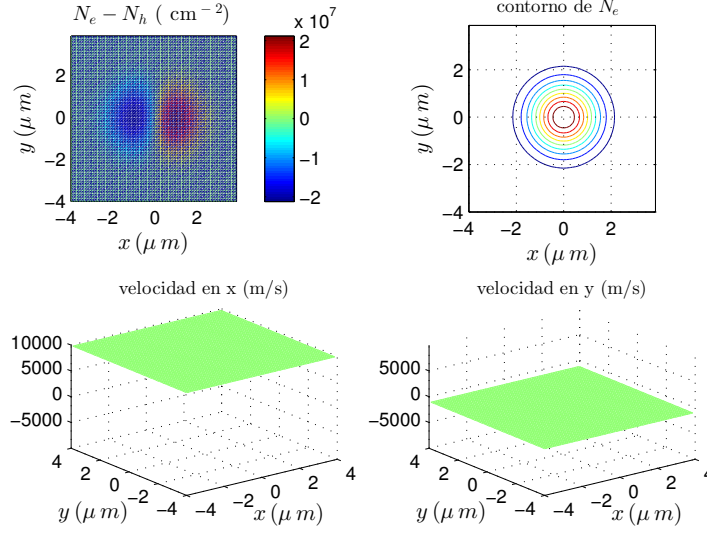


Figura 4.1: (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^4$ ms $^{-1}$ en $t = 4.82$ ps.

Para verificar si la distribución de las cargas y velocidades de la solución numérica del modelo, muestran la dinámica típica de partículas en presencia de un campo magnético, podemos calcular la frecuencia y el radio de ciclotrón, definidas mediante las siguientes fórmulas [86], respectivamente

$$\omega_c = \frac{|e| H}{m_e} \quad (4.19)$$

$$R_c = \frac{u_0}{\omega_c} \quad (4.20)$$

donde e , m_e y u_0 son la carga del electrón, la masa efectiva del electrón y la velocidad inicial local, respectivamente. Usando los valores de las constantes físicas en la tabla 3.1, para un campo magnético de $H = 1$ T, la frecuencia del ciclotrón es $\omega_c = 2.6 \times 10^{12}$ s $^{-1}$. Mientras que para una velocidad inicial de $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$, el radio del ciclotrón es $R_c = 0.38$ μ m.

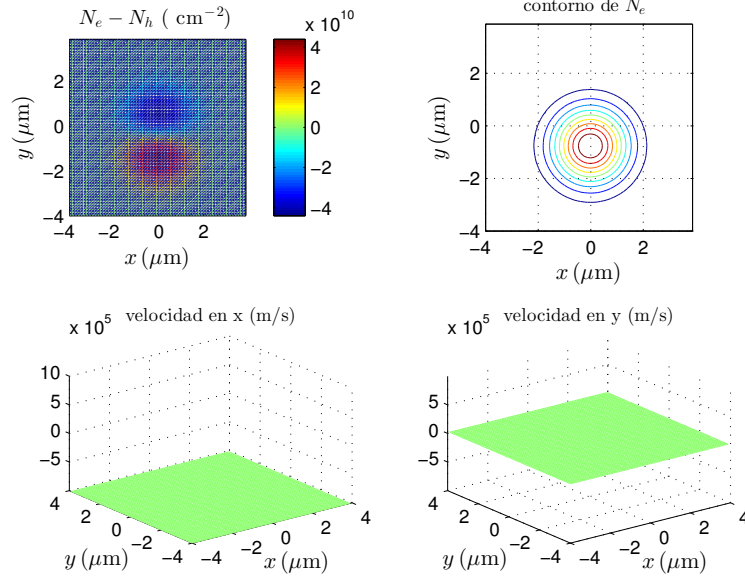


Figura 4.2: (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$ en $t = 1.20$ ps.

Con objeto de probar que las partículas del sistema rotan con frecuencia ω_c y radio R_c resolvemos numéricamente el sistema (4.2)-(4.14) para $H = 1$ T y $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$. Observando la trayectoria seguida por el valor máximo de la densidad de electrones N_e , encontramos que ésta describe una trayectoria circular cerrada con periodo $P = 2.42 \times 10^{-12}$ s, por lo tanto, la frecuencia correspondiente es

$$\Omega = \frac{2\pi}{P} = \frac{2\pi}{2.42 \times 10^{-12} \text{ s}} = 2.6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1} = \omega_c,$$

lo cual significa que, efectivamente, la frecuencia calculada a partir de los datos de la simulación (Ω), concuerda con el valor de ω_c , dado por la fórmula (4.19) a partir de las constantes físicas del problema.

Por otra parte, para calcular el radio de rotación r , centramos nuestra atención en el máximo de N_e para $t = 0$, el cual se alcanza en el origen $Q_1 = (0, 0)$ y calculamos la trayectoria seguida por este máximo durante medio periodo,

esto es, $0 \leq t \leq P/2$. Para $t = P/2$ el máximo se colocará en la posición $Q_2 = (x_{P/2}, y_{P/2}) = (0, -0.75)$. Por lo tanto, el radio de la trayectoria cerrada descrita por el máximo de N_e es la mitad de la distancia entre Q_1 y Q_2 . Eso es

$$r = \frac{1}{2} \sqrt{x_{P/2}^2 + y_{P/2}^2} = 3.8 \times 10^{-7} \text{ m} = 0.38 \mu \text{ m} = R_c$$

es decir también concuerda con el valor teórico dado por la fórmula (4.20).

Para comprobar que efectivamente el radio y la frecuencia son los esperados de acuerdo a las fórmulas (4.19) y (4.20), hemos hecho además varios experimentos numéricos para $H = 1$ y diferentes valores de u_0 . En todos los casos siempre hemos encontrado que las partículas giran a la frecuencia del ciclotrón y describen círculos cuyos radios coinciden con el valor del radio de ciclotrón correspondiente.

4.4.2. Caso sin fricción.

En esta sección consideramos el caso en el que los tiempos de relajación también se han hecho tender a infinito, pero la interacción de la fuerza de Coulomb coexiste junto con el campo magnético. En ese caso, la ecuación (4.3) toma la forma

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{e\mathbf{E}}{m_e} + \frac{\mathbf{F}_L}{m_e} \quad (4.21)$$

Los valores característicos son los mismos que en el caso anterior, luego las correspondientes ecuaciones adimensionales son

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -aI_1 + vH_{SD}, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -aI_2 - uH_{SD} \quad (4.23)$$

donde $a = \frac{e^2 \Omega_{pl}^{-1} N_s}{em_e \Lambda} = 0.7186$.

Al igual que en el caso anterior, para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones (4.22)-(4.23) utilizamos el esquema AB3 para evolucionar en el tiempo el sistema. En este caso los campos eléctrico y magnético compiten y las velocidades dejan de ser uniformes en el espacio pero se mantiene la oscilación con el tiempo. Para ciertos valores de la velocidad inicial y del

campo magnético, como por ejemplo $u_0 = 1 \times 10^4 \text{ ms}^{-1}$ y $H = 3 \text{ T}$, las fuerzas se compensan y el esquema numérico es estable como se observa en la figura 4.3. Sin embargo, para velocidades iniciales más altas ($u_0 = 1 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}$) y un campo magnético de $H = 1 \text{ T}$, el esquema se vuelve inestable. Para evitarlo usamos el esquema semi-implícito AB3CN. Como ya vimos anteriormente, para utilizar este esquema las ecuaciones diferenciales deben tener la forma (2.70), así que el sistema de ecuaciones (4.22)-(4.23) se puede reescribir como

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \begin{pmatrix} 0 & -H_{SD} \\ H_{SD} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{I} \quad (4.24)$$

donde

$$L(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} 0 & -H_{SD} \\ H_{SD} & 0 \end{pmatrix}, \quad H(\mathbf{u}) = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{I}$$

$$\text{con } \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -aI_1 \\ -aI_2 \end{pmatrix}.$$

Nótese que el operador diferencial lineal no es diagonal, pero bajo el cambio de base

$$\mathbf{u} = A\mathbf{Z} \quad (4.25)$$

donde $\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$ es la matriz de cambio de base, el sistema de ecuaciones diferenciales (4.22)-(4.23) se transforma en

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} + \begin{pmatrix} -iH_{SD} & 0 \\ 0 & iH_{SD} \end{pmatrix} \mathbf{Z} = -[(\mathbf{Z}^t A^t) \cdot \nabla] \mathbf{Z} + A^{-1} \mathbf{I} \quad (4.26)$$

Como se puede observar, el término lineal de las ecuaciones en esta nueva base es diagonal y ahora sí podemos aplicar el esquema AB3CN sobre estas ecuaciones definidas en un nuevo conjunto de variables z y w . Luego para obtener los correspondientes resultados en las variables originales, basta usar la fórmula (4.25). Con este cambio de base hemos logrado tomar velocidades más altas sin tener que aumentar el campo magnético.

Para esta simulación usamos una discretización espacial con $N = 2^7$ nodos equiespaciados y la correspondiente diferenciación espectral. En la figura 4.3 se pueden observar las soluciones para $u_0 = 1 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$ y $H = 3 \text{ T}$ en $t = 1.20 \text{ ps}$. Se puede apreciar que la distribución de la densidad de electrones, al

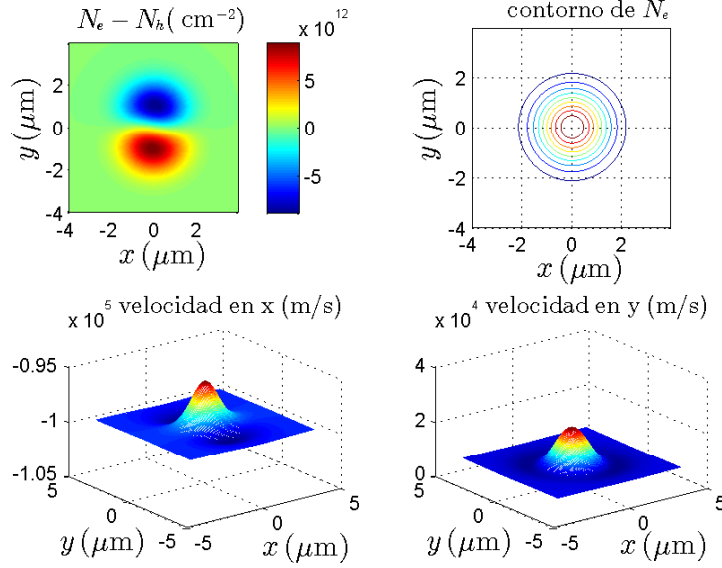


Figura 4.3: (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 3$ T, $u_0 = 10^5 \text{ ms}^{-1}$ en $t = 1.20$ ps.

igual que el caso anterior también rota, pero con estos valores de la velocidad y el campo magnético el radio de rotación es pequeño, mientras que las componentes de la velocidad en las direcciones x e y oscilan con valores en el intervalo $[-u_0, u_0]$, pero ya no son espacialmente uniformes.

Por otro lado, en la figura 4.4 vemos que para velocidades más altas ($u_0 = 1 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}$) y un campo magnético de $H = 1$ T, en $t = 1.20$ ps, existe un comportamiento similar al caso previo, pero ahora los patrones de la distribución de la densidad de electrones y las componentes de la velocidad son más complejos. En particular, las líneas de contorno de N_e cambian de forma circular a elíptica y su eje se deforma ligeramente, como se puede ver en la figura 4.5, que presenta soluciones en $t = 1.82$ ps.

Podemos concluir que para un campo magnético aplicado con intensidad $H \geq 1$, la evolución temporal de la distribución de la densidad de electrones conduce a patrones más complejos cuando incrementamos el valor de la primera componente de la velocidad inicial.

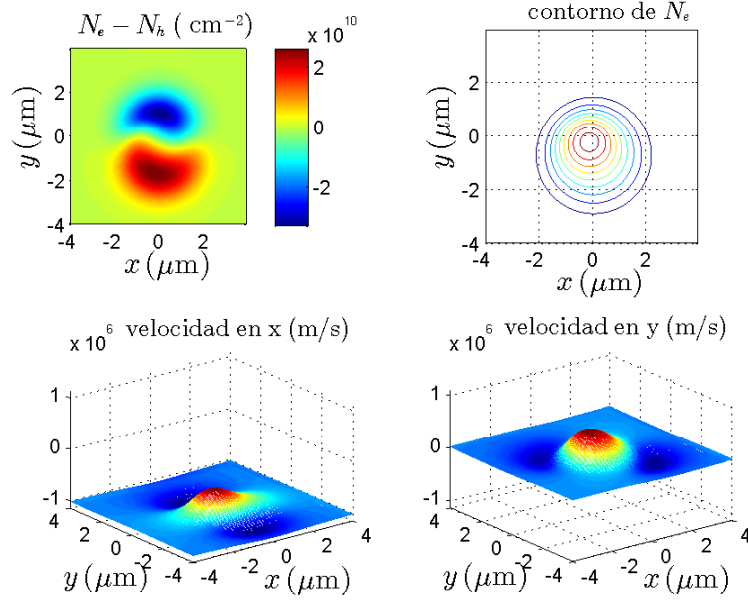


Figura 4.4: (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1 \text{ T}$, $u_0 = 10^6 \text{ ms}^{-1}$ en $t = 1.20 \text{ ps}$.

4.4.3. Modelo completo.

Finalmente, consideramos el modelo completo dado por las ecuaciones (4.2)-(4.3), cuyas ecuaciones adimensionales son (4.11)-(4.13).

Para resolver numéricamente el modelo 2D con la fuerza de Lorentz hemos usado el esquema semi -implícito AB3CN. Para esto debemos reescribir este sistema en la forma

$$\mathbf{u}_t + \mathcal{L}(\mathbf{u}) = \mathcal{H}(\mathbf{u}), \quad (4.27)$$

donde \mathcal{L} y \mathcal{H} son operadores diferenciales lineal y no lineal, respectivamente. Reescribiendo (4.12) y (4.13) de esta forma e incorporando la ecuación para

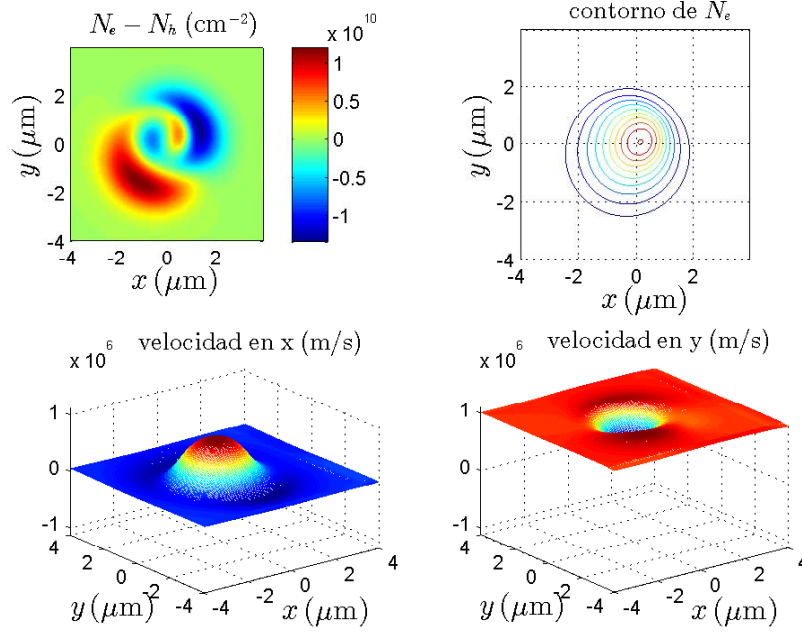


Figura 4.5: (arriba izquierda) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (arriba derecha) contorno de N_e , (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$ en $t = 1.82$ ps.

la densidad N_e (4.11), se tiene

$$Ne_t = -(u_x + v_y)Ne - uNe_x - vNe_y \quad (4.28)$$

$$u_t + Gu = -uu_x - vv_y - aI_1 + vH_{SD} \quad (4.29)$$

$$v_t + Gv = -uv_x - vv_y - aI_2 - uH_{SD} \quad (4.30)$$

donde $G = 1 + bN_h/q$.

Con objeto de analizar el patrón de la distribución de la densidad de electrones $N_e - N_h$ y de las componentes de las velocidades u y v , hemos ejecutado simulaciones usando una discretización espacial con $N = 2^6$ nodos Chebyshev, para diferentes valores del campo magnético y de la velocidad inicial en x (la condición inicial para la componentes v de la velocidad en la dirección y siempre es nula de acuerdo con [1]).

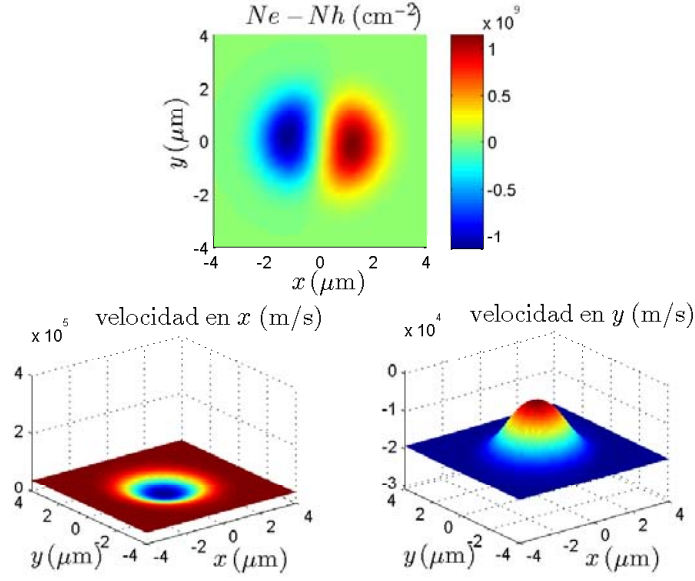


Figura 4.6: (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 1$ T, $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 0.18$ ps.

Para hacer el análisis, tomamos como condición inicial la velocidad $\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0)$, donde $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$ y $v_0 = 0$ ms $^{-1}$. Las figuras 4.6 y 4.7 muestran el patrón de la distribución de la densidad de los electrones $N_e - N_h$ y los perfiles de las componentes de la velocidad u y v en el tiempo $t = 0.18$ ps, para intensidades del campo magnético $H = 1$ T y $H = 20$ T, respectivamente.

Para el caso $H = 1$ T, la evolución en el tiempo es la siguiente: al principio, durante un corto periodo de tiempo, los patrones de la distribución de la densidad de los electrones rotan suavemente. Al mismo tiempo, las componentes de la velocidad local oscilan de forma opuesta. Para tiempos largos, la solución numérica de (4.2)-(4.3) se acerca a un estado de equilibrio estacionario.

Para el caso $H = 20$ T, el perfil de la evolución en el tiempo es similar pero la rotación y la oscilación son más rápidas. La figura 4.8 muestra la evolución temporal del valor máximo de la primera componente de la velocidad local cuando la velocidad inicial es $\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0) = (4 \times 10^5$ ms $^{-1}$, 0 ms $^{-1}$). El amortiguamiento de u depende del valor de esta velocidad inicial. Cuanto mayor sea la velocidad inicial, más rápido será el amortiguamiento. Hemos

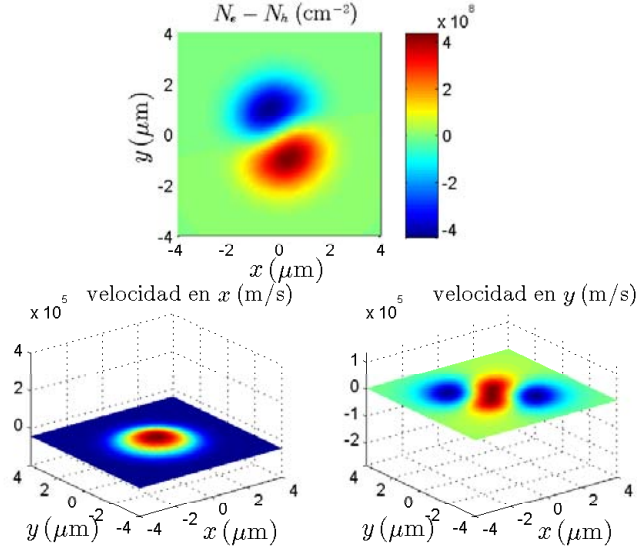


Figura 4.7: (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 20$ T, $u_0 = 4 \times 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 0.18$ ps.

hecho varios experimentos numéricos variando H entre 1 y 20 T, y u_0 de 10^4 ms $^{-1}$ a 10^6 ms $^{-1}$. Para tiempos largos, encontramos que la solución numérica del modelo alcanza un estado de equilibrio estacionario. En particular, la velocidad siempre tiende a cero (véase la figura 4.9).

4.5. Análisis del desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones.

De acuerdo con [1], el desplazamiento medio de la mancha de electrones en la dirección horizontal está dado por

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{N_t} \int x N_e(\mathbf{r}, t) dx dy, \quad (4.31)$$

Analogamente, el desplazamiento medio de la mancha en la dirección vertical es

$$\langle y(t) \rangle = \frac{1}{N_t} \int y N_e(\mathbf{r}, t) dx dy, \quad (4.32)$$

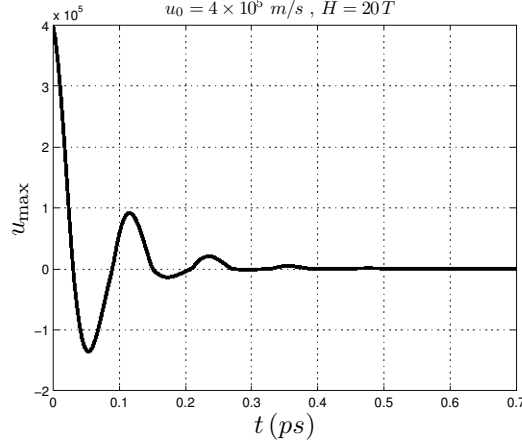


Figura 4.8: Evolución temporal del valor máximo de la primera componente de la velocidad local, u , cuando la velocidad inicial es $u_0 = 4 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$, para $H = 20 \text{ T}$.

donde $N_t = \int N_e(\mathbf{r}, t) dx dy$.

El movimiento de la mancha generará un momento eléctrico dipolar, proporcional a $\langle x(t) \rangle$ e $\langle y(t) \rangle$, y la correspondiente radiación con intensidad proporcional a

$$\left[\frac{d^2 \langle x(t) \rangle}{dt^2} \right]^2 \quad \text{y} \quad \left[\frac{d^2 \langle y(t) \rangle}{dt^2} \right]^2, \quad (4.33)$$

respectivamente.

En nuestro estudio, analizamos el espectro de estas radiaciones calculando

$$I_x(\omega) = \left[\int_0^\infty \frac{d^2 \langle x(t) \rangle}{dt^2} e^{i\omega t} dt \right]^2; \text{ e } I_y(\omega) = \left[\int_0^\infty \frac{d^2 \langle y(t) \rangle}{dt^2} e^{i\omega t} dt \right]^2 \quad (4.34)$$

A fin de comparar los resultados de los casos analizados en las secciones 4.4.1, 4.4.2 y 4.4.3, hemos calculado gráficas para el desplazamiento medio de la mancha (4.31)-(4.32), las radiaciones (4.33) y el espectro (4.34), para cada uno de los casos en las direcciones x e y respectivamente.

Para el caso sin la interacción de la fuerza de Coulomb, estudiado en la sección 4.4.1, las figuras 4.10 y 4.11 muestran la evolución periódica en el tiempo, del desplazamiento medio de la mancha en la dirección horizontal y

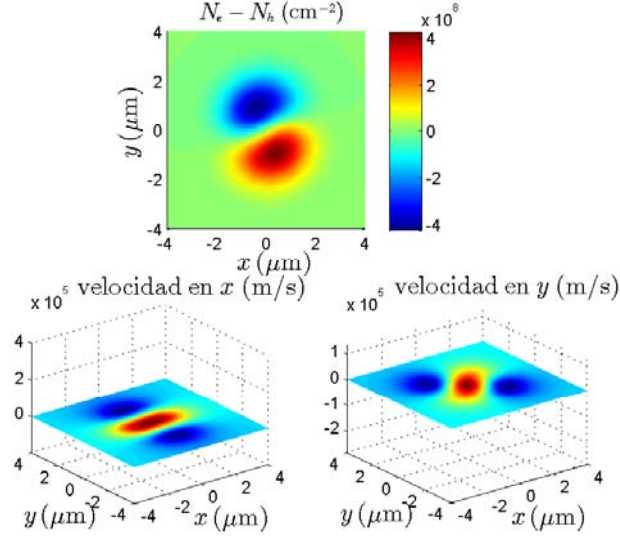


Figura 4.9: (arriba) Patrón de la distribución de la densidad de electrones ($N_e - N_h$), (abajo) componentes de la velocidad: u (izquierda) y v (derecha) para $H = 20$ T, $u_0 = 10^5$ ms $^{-1}$ en $t = 1.0$ ps.

vertical respectivamente, aplicando un campo magnético de $H = 1$ T, para una velocidad inicial $u_0 = 10^6$ ms $^{-1}$. En ambos casos la evolución temporal de las radiaciones (4.33) son periódicas con amplitudes similares. Los valores máximos de los espectros $I_x(\omega)$ e $I_y(\omega)$ se alcanzan en el mismo valor de la frecuencia, $\omega = 2.6 \times 10^{12}$ s $^{-1}$.

Para el caso sin fricción, que estudiamos en la sección 4.4.2, las figuras 4.12 y 4.13 muestran la evolución temporal oscilatoria del desplazamiento medio en la dirección horizontal y vertical, respectivamente, aplicando un campo magnético de $H = 1$ T y una velocidad inicial $u_0 = 10^5$ ms $^{-1}$. En ambos casos la evolución temporal de las radiaciones (4.33), es oscilatoria con amplitudes decrecientes. Una vez más, los valores máximos de $I_x(\omega)$ e $I_y(\omega)$ se alcanzan en el mismo valor de la frecuencia, $\omega = 2.7 \times 10^{12}$ s $^{-1}$.

Finalmente, para el caso del modelo completo, tratado en la sección 4.4.3, las figuras 4.14 y 4.15 muestran la evolución amortiguada temporal de desplazamiento medio de la mancha en la dirección horizontal y vertical respectivamente, para el valor más alto del campo magnético $H = 20$ T y para la

velocidad inicial $u_0 = 4 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$. En ambos casos, la evolución temporal de las radiaciones (4.33), son similares. Los valores máximos de $I_x(\omega)$ e $I_y(\omega)$ se alcanzan en el mismo valor de la frecuencia, $\omega = 50 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$.

En todos los casos anteriores, las derivadas de segundo orden las hemos calculado usando fórmulas de diferencias finitas de segundo orden

$$\frac{d^2 f(t_i)}{dt^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \quad (4.35)$$

donde $h = t_{i+1} - t_i$. Mientras que para calcular el espectro I_x e I_y hemos usado la Transformada Rápida de Fourier.

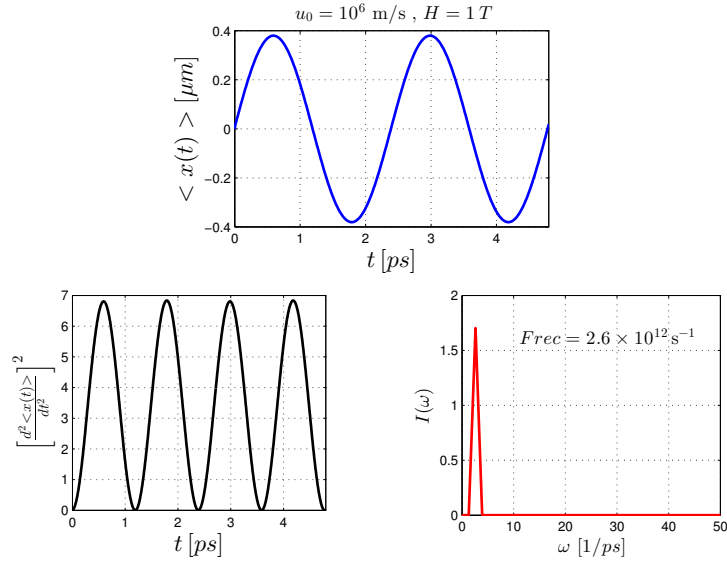


Figura 4.10: Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.14).

4.6. Conclusiones.

En este capítulo hemos extendido el modelo bidimensional para las corrientes inyectadas ópticamente incorporando la influencia de un campo magnético aplicado a lo largo del eje z , lo cual se consigue añadiendo la fuerza de Lorentz a la ecuación de la velocidad.

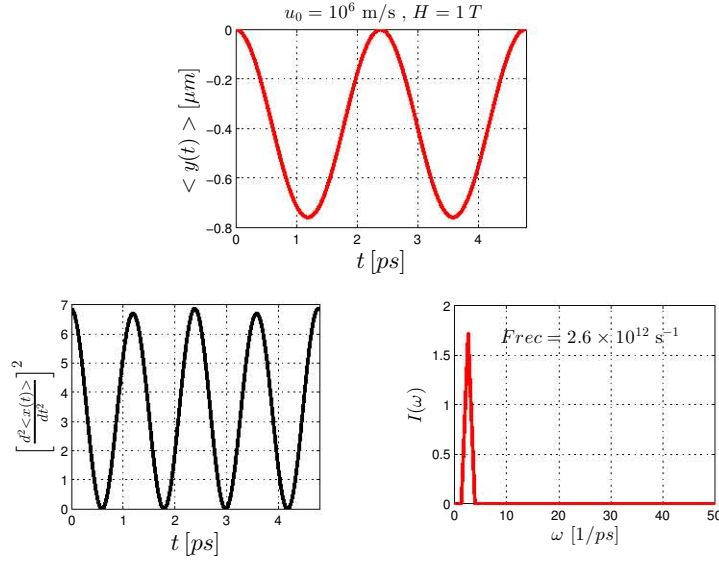


Figura 4.11: Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.14).

Hemos aplicado los métodos espectrales para resolver la parte espacial del modelo y un método semi-implícito para la integración de la variable temporal, lo cual nos ha permitido construir un esquema numérico suficientemente robusto y eficaz que nos permite no solo obtener soluciones para el modelo completo, sino también estudiar dos casos límites, sin que los patrones complejos que se obtienen en las distribuciones de las densidades desestabilicen el método.

Los resultados obtenidos de la simulación numérica del caso con tiempos de relajación grandes sin la interacción de la fuerza de Coulomb nos han permitido verificar que la frecuencia y el radio del ciclotrón de dichos resultados concuerdan con los valores teóricos obtenidos a partir de las constantes físicas del problema.

Los resultados de la simulación para los tres casos estudiados nos han permitido observar diferentes patrones en la dinámica de la distribución de la densidad de electrones. Dichos patrones dependen de la intensidad del campo magnético aplicado, así como también de la velocidad inicial.

Para el caso con los tiempos de relajación grandes y sin la fuerza de Coulomb el movimiento del cambio en la distribución de la densidad de los electrones es de tipo oscilatorio. Igualmente las componentes de las velocidades u y v oscilan pero de forma desfasada y toman valores constantes en las

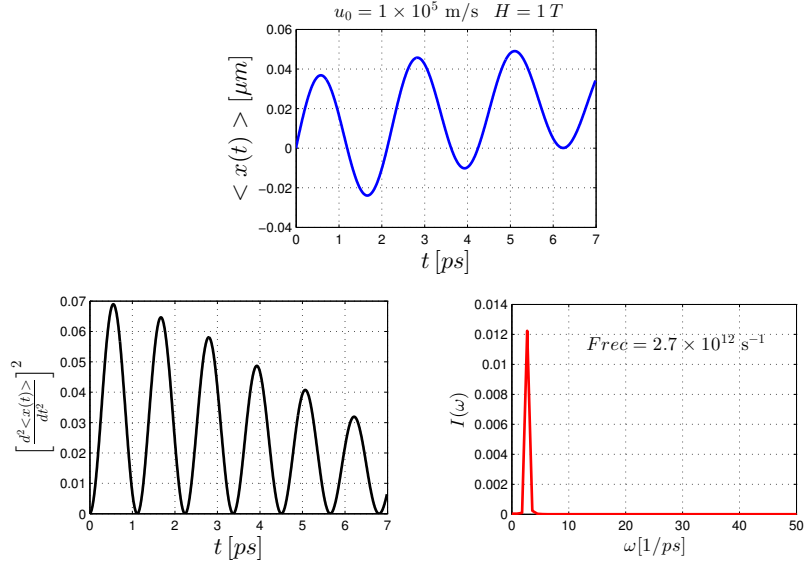


Figura 4.12: Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.21).

variables espaciales.

En el caso con cero fricción, donde los tiempos de relajación son también muy grandes, pero la interacción de la fuerza de Coulomb es aplicada junto con el campo magnético, los patrones de la dinámica de los electrones son también circulares, pero mucho más complejos que el caso sin las fuerzas de Coulomb, mientras que las componentes de la velocidad media u y v también oscilan pero ya no son constantes espacialmente.

Para el caso del modelo completo, los patrones de la distribución de la densidad de electrones son igualmente circulares, pero el radio de rotación es muy pequeño porque la rotación es muy suave, pero para tiempos relativamente largos la solución numérica tiende a un estado estacionario.

Por otro lado, el análisis espectral del desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones nos han permitido comprobar las frecuencias y los radios de rotación de cada uno de los casos estudiados.

Finalmente cabe señalar que, dado que existen pocos estudios teóricos sobre el tema de la influencia de campos magnéticos en la dinámica de las corrientes generadas mediante inyección óptica en dispositivos de pozos cuánticos [66], en este trabajo es la primera vez que se analiza numéricamente la aplicación de un campo magnético en un modelo de inyección óptica.

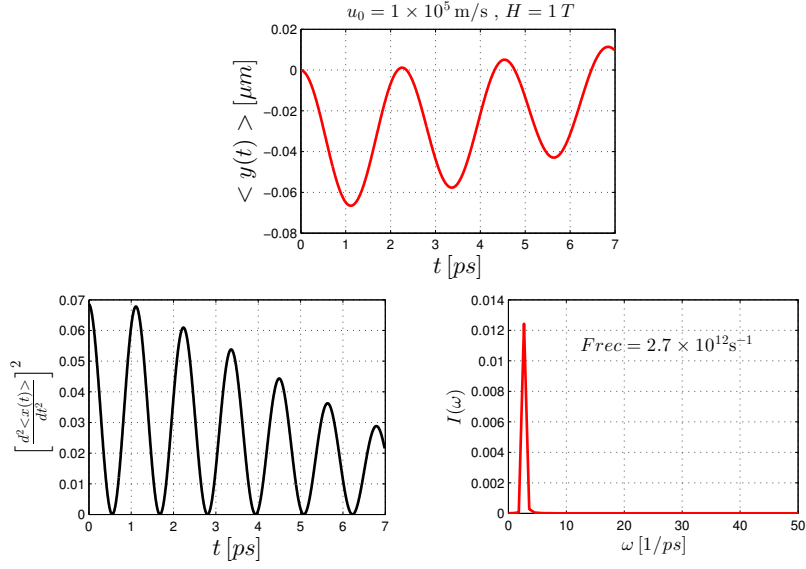


Figura 4.13: Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.21).

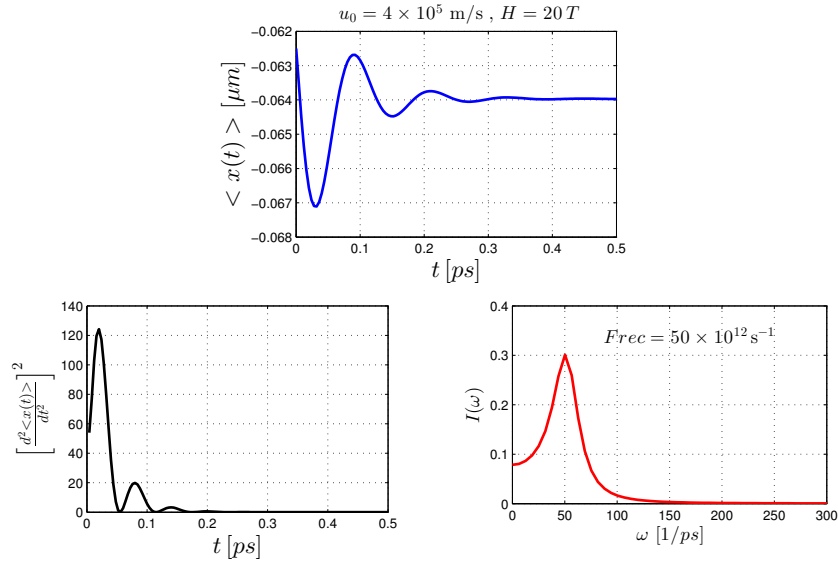


Figura 4.14: Análisis espectral de $\langle x(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.3).

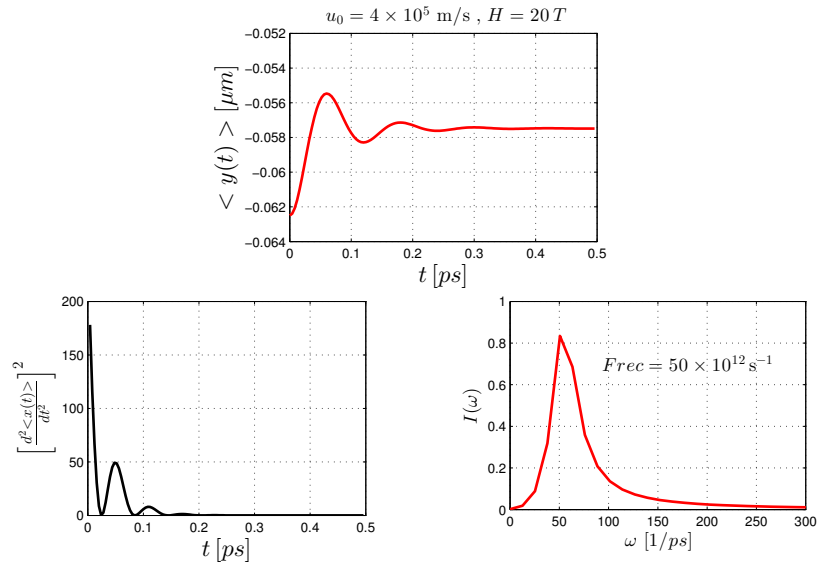


Figura 4.15: Análisis espectral de $\langle y(t) \rangle$ para el sistema (4.2)-(4.3).

Capítulo 5

Modelo 1D de la dinámica de corrientes inyectadas ópticamente.

5.1. Introducción.

En el capítulo 3 se describe la resolución del modelo hidrodinámico bidimensional de las corrientes inyectadas ópticamente mediante métodos espectrales. Los resultados obtenidos sugieren que cuando se aplica una velocidad inicial en una única dirección, la dinámica de los portadores tiene un comportamiento predominantemente unidimensional, es decir, el desplazamiento y los patrones que se forman ocurren principalmente en una dirección (véase las figuras 3.11 y 3.14). Este hecho nos ha motivado a investigar si es posible reproducir los resultados obtenidos con el modelo bidimensional completo, mediante una versión unidimensional del mismo.

En este capítulo se describe dicha formulación unidimensional del modelo completo (3.1)-(3.2), utilizando una aproximación de ondas planas. Esta formulación, aunque es más simple, contiene la física principal del modelo original.

Para resolver numéricamente este modelo escribimos las ecuaciones en un sistema de coordenadas comóviles de manera que el dominio de soporte sea fijo. Las ecuaciones resultantes en dicho sistema de coordenadas se resuelven usando métodos espectrales. Al igual que en el caso bidimensional, también en este caso el campo eléctrico para las soluciones con ondas planas debe considerarse como el valor principal de Cauchy de un producto de convolución que contiene un núcleo singular de tipo Hilbert. Este tipo de convolución ocurre no solamente en electrodinámica sino también en teoría

de respuesta lineal, procesamiento de señales, teoría de funciones analíticas y transformadas de Hilbert. Recientemente ha habido un considerable interés en la utilización de métodos de convolución singular discreta [87, 88], para calcular estas convoluciones. En nuestro enfoque, calculamos los valores de los coeficientes de la transformada de Fourier de los núcleos con muy alta precisión, con objeto de optimizar el método numérico. Por otro lado, para calcular las derivadas espaciales, al igual que en el caso bidimensional, usamos la Transformada Rápida de Fourier que proporciona alta precisión a un bajo coste computacional.

5.1.1. Organización del capítulo.

El contenido de este capítulo está organizado de la siguiente manera: En la sección 5.2 introducimos la aproximación con ondas planas para derivar el modelo 1D de las ecuaciones. La sección 5.3 contiene la derivación de las ecuaciones en un sistema de coordenadas comóviles que usamos para resolver numéricamente el modelo. En la sección 5.4 describimos detalladamente los métodos espectrales basados en la Transformada Rápida de Fourier, que usamos para resolver numéricamente las ecuaciones del modelo. En la sección 5.5 presentamos los resultados numéricos equivalentes al caso considerado en [1]. También se presentan resultados para el caso en que la densidad de los huecos se supone igual a cero y describimos una solución asintótica que es válida para tiempos largos. Finalmente la sección 5.6 contiene las conclusiones de este capítulo.

5.2. Derivación del modelo.

Para reducir el modelo 2D a un modelo 1D, buscaremos soluciones de ondas planas para el sistema (3.1)-(3.2). Esto es, supondremos que el movimiento tiene lugar en una única dirección y que es constante en la dirección perpendicular. Es decir,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u(x, t) \mathbf{i}, \quad (5.1)$$

$$N_e(\mathbf{r}, t) = N_e(x, t), \quad N_h(\mathbf{r}) = N_e(x). \quad (5.2)$$

Reemplazando (5.1) y (5.2) en la ecuación (3.1) obtenemos:

$$(N_e)_t + \nabla \cdot (u N_e \mathbf{i}) = 0 \quad (5.3)$$

Para escribir la ecuación (3.2) en términos de ondas planas, es necesario derivar expresiones para los campos eléctricos \mathbf{E}^e y \mathbf{E}^h . Para ello, introducimos los cambios de variables, $X = x - x'$, $Y = y - y'$, por lo tanto $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{R}$ en las ecuaciones (3.4) y (3.5) y obtenemos una forma simplificada para el campo eléctrico:

$$\mathbf{E} = \frac{e}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|^3} d\mathbf{R}, \quad (5.4)$$

Esta integral debe ser interpretada como un valor principal y por lo tanto, para calcular su valor, debemos excluir una región cuadrada muy pequeña centrada en el origen y hallar el límite de la integral fuera de este cuadrado. El campo eléctrico para los electrones, \mathbf{E}^e , se obtiene haciendo $N(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = N_e(\mathbf{r} - \mathbf{R}, t)$ y el campo eléctrico para los huecos, \mathbf{E}^h , se obtiene haciendo $N(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = -N_h(\mathbf{r} - \mathbf{R})$. Como estamos considerando ondas planas entonces se tiene que $N(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = N_e(x - X)$, por lo tanto:

$$\mathbf{E} = \frac{e}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} N(x - X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X\mathbf{i} + Y\mathbf{j}}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX dY \quad (5.5)$$

En el Apéndice A calculamos esta integral, obteniendo que:

$$\mathbf{E} = \frac{2e}{\epsilon} (K * N) \mathbf{i} \quad (5.6)$$

con $K(x) = \frac{1}{x}$; $N = N_e(x, t)$, $-N_h(x)$ para electrones y huecos, respectivamente.

Sustituyendo (5.6) en (3.2) y usando el hecho de que para ondas planas $\mathbf{u}_t = u_t \mathbf{i}$, $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = u \partial_x (\mathbf{u}) = uu_x \mathbf{i}$ y reescribiendo la ecuación (5.3) sin el vector \mathbf{i} se obtiene que

$$(N_e)_t + (u N_e)_x = 0 \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} u_t + uu_x &= \frac{2e^2}{\epsilon m_e} (K * N_e) - \\ &- \left(\frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_{eh}} \frac{N_h}{N_0} \right) u - \frac{2e^2}{\epsilon m_e} (K * N_h) \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde

$$(K * N)(x, t) = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x - x'} N(x', t) dx' \quad (5.9)$$

son las ecuaciones del modelo 1D.

La integral (5.9) representa la convolución del núcleo $K = K(x) = 1/x$ con la fuerza de repulsión entre los portadores con densidad $N(x, t)$. Dado que K es singular, esta convolución tiene que ser interpretada como valor principal de Cauchy (v.p.). La fuerza resultante es repulsiva: para $x > x'$, la carga en x' acelera la carga en x , y para $x < x'$, la carga en x' desacelera la carga en x .

5.2.1. Adimensionalización.

$[N_e], [N_h]$	$[u]$	$[x]$	$[t]$	
N_s	u_0	$\tau_e u_0$	τ_e	τ_{eh}
10^{15}m^{-2}	10^5m/s	nm	fs	fs
1.0	4.0	8.0	80	150

Tabla 5.1: Parámetros dimensionales y constantes físicas para el modelo 1D [1].

Tomando las variables adimensionales: $\hat{x} = x/[x]; \hat{t} = t/[t]; \hat{u} = u/[u]; \hat{\rho} = N_e/[N_e]; \hat{N}_h = N_h/[N_h]$ (donde $[]$ son las unidades de la tabla 5.1), las ecuaciones (5.7) y (5.8) dan como resultado,

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0 \quad (5.10)$$

$$u_t + uu_x = c(K * \rho) - \alpha u - c(K * N_h). \quad (5.11)$$

donde

$$c = \frac{2e^2 \tau_e N_s}{\epsilon m_e u_0} \quad (5.12)$$

$$\alpha(x) = 1 + \frac{\tau_e N_h}{\tau_{eh} N_0} \quad (5.13)$$

Por simplicidad hemos omitido las tildes sobre las variables de las ecuaciones anteriores. Usando los valores característicos de la tabla 5.1 podemos estimar el valor $c \approx 0.1466$.

Finalmente tenemos que (5.10) y (5.11) son las ecuaciones simplificadas 1D del modelo que hemos construido usando ondas planas. Estas ecuaciones,

aunque simples, conservan la física del problema original. Por ejemplo, las integrales que definen los campos eléctricos todavía están presentes, pero convertidas en convoluciones, que calcularemos aprovechando las propiedades de la Transformada Rápida de Fourier.

5.3. Modelo 1D en coordenadas comóviles.

Consideremos el caso en que la solución del modelo (5.10)-(5.11) es suave y la condición inicial para ρ , $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$, tiene soporte compacto. Así ρ_0 se anula cuando x está fuera de algún intervalo $a_0 < x < b_0$. De la ecuación (5.10) se tiene, en general, que ρ se anula cuando x está fuera del intervalo $a(t) < x < b(t)$, donde

$$\dot{a} = u(a, t), \quad \dot{b} = u(b, t), \quad (5.14)$$

tienen como condiciones iniciales $a(0) = a_0$ y $b(0) = b_0$, respectivamente.

Por lo tanto de las ecuaciones (5.11) y (5.14) se obtiene que

$$\ddot{a} = c\beta_a - \alpha_a \dot{a} - f_a, \quad \ddot{b} = c\beta_b - \alpha_b \dot{b} - f_b, \quad (5.15)$$

donde $\beta_a = \beta_a(t) = (K * \rho)(a, t)$, $\beta_b = \beta_b(t) = (K * \rho)(b, t)$, $\alpha_a = \alpha_a(t) = \alpha(a, t)$, $\alpha_b = \alpha_b(t) = \alpha(b, t)$, $f_a = c(K * N_h)(a, t)$, y $f_b = c(K * N_h)(b, t)$.

Nótese que aunque las ecuaciones (5.10) y (5.11) toman valores fuera del intervalo donde se encuentra la carga ($a < x < b$), estos valores no tienen significado físico. Como sólo nos interesa encontrar soluciones dentro de este intervalo, esto motiva el siguiente cambio de variables

$$x = a + \frac{\Gamma}{\gamma}(y - y_a), \quad (5.16)$$

cuya inversa es

$$y = y_a + \frac{\gamma}{\Gamma}(x - a) \quad (5.17)$$

donde $\gamma > 0$ y y_a son constantes arbitrarias, y $\Gamma = \Gamma(t) = b - a > 0$. En estas nuevas coordenadas transformadas (*comóviles*), el intervalo correspondiente al que nos interesa $a < x < b$, es el intervalo $y_a < y < y_b = y_a + \gamma$. Por lo tanto, con esta transformación de coordenadas hemos logrado confinar la parte relevante de la física del problema en un intervalo fijo. En este sistema

de coordenadas comóviles podemos reescalar las variables ρ y u en nuevas variables definidas como

$$R = \frac{\Gamma}{\gamma} \rho, \quad (5.18)$$

$$U = \frac{\gamma}{\Gamma} \left(u - (1 - \mu) \frac{da}{dt} - \mu \frac{db}{dt} \right), \quad (5.19)$$

donde $\mu = \frac{y - y_a}{\gamma} = \frac{x - a}{\Gamma}$. Nótese que μ es una función lineal de y que varía en el rango $0 < \mu < 1$ cuando y varía dentro de la región de interés $y_a < y < y_b$.

De este modo, la densidad en coordenadas comóviles R está confinada entre y_a y y_b , y la correspondiente velocidad U es cero en y_a e y_b . Con estas escalas, las ecuaciones (5.10) y (5.11) toman la forma

$$R_t + (RU)_y = 0, \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} U_t + U U_y &= \left(\frac{\gamma}{\Gamma} \right)^2 c (B - (1 - \mu) B_a - \mu B_b) - \\ &- \left(\alpha + 2 \frac{\dot{\Gamma}}{\Gamma} \right) U - \frac{\gamma}{\Gamma} \left((1 - \mu) (\alpha - \alpha_a) \dot{a} + \mu (\alpha - \alpha_b) \dot{b} \right) - \\ &- \left(\frac{\gamma}{\Gamma} \right)^2 c (F - (1 - \mu) F_a - \mu F_b), \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\ddot{a} = \frac{c\gamma}{\Gamma} (B_a - F_a) - \alpha_a \dot{a}, \quad (5.22)$$

$$\ddot{b} = \frac{c\gamma}{\Gamma} (B_b - F_b) - \alpha_b \dot{b}, \quad (5.23)$$

donde

$$B = K * R = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y - y'} R(y', t) dy', \quad (5.24)$$

$$F = \frac{\Gamma}{\gamma} (K * N_h) = \frac{\Gamma}{\gamma} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y - y'} N_h(y') dy', \quad (5.25)$$

con $B_a = B(y_a, t)$, $B_b = B(y_b, t)$, $F_a = F(y_a)$ y $F_b = F(y_b)$.

Por lo tanto, si consideramos una solución del sistema de ecuaciones (5.20)-(5.23), tal que U se anula idénticamente en $y = y_a$ e $y = y_b$, entonces una solución del sistema (5.10)-(5.11) se obtiene de la transformación

inversa

$$\rho = \frac{\gamma}{\Gamma} R \quad (5.26)$$

$$u = \frac{\Gamma}{\gamma} U + (1 - \mu) \dot{a} + \mu \dot{b} \quad (5.27)$$

De la ecuación (5.19) se tiene que $U(y_a, t) = U(y_b, t) = 0$. De igual manera, el lado derecho de la ecuación (5.21) también se anula en y_a e y_b . Recíprocamente, si consideramos una solución suave de (5.20)-(5.23), con $U(y_a, 0) = U(y_b, 0) = 0$, entonces se obtiene inmediatamente que $U(y_a, t) = U(y_b, t) = 0$.

5.4. Resolución numérica del modelo 1D.

Para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones (5.20)-(5.23) en el sistema de coordenadas comóviles (y, t) , hemos escogido constantes arbitrarias $y_a = \pi/4$, $\gamma = \pi/2$, tal que $y_b = y_a + \gamma = 3\pi/4$ y por lo tanto, la parte físicamente relevante de la solución está confinada en el intervalo fijo $\pi/4 \leq y \leq 3\pi/4$. Sin embargo, extenderemos el dominio actual de la integración numérica a un dominio más amplio $[y_c, y_d] = [0, \pi]$, aunque sólo nos interese lo que sucede en $[y_a, y_b]$, que es el dominio del soporte de R . De esta manera, dos soluciones diferentes que inicialmente coinciden en el dominio $[y_a, y_b]$, permanecerán iguales en el interior de ese dominio para todos los tiempos. En efecto, podemos modificar las variables fuera de $[y_a, y_b]$ y esta modificación no tendría ningún efecto en la solución dentro de este intervalo.

Por otro lado, los métodos espectrales requieren que las variables sean continuas en los puntos extremos del dominio. Para este fin, usamos una función Mollifier $S(s; s_1, s_2, s_3, s_4)$ tal que,

$$S(s; s_1, s_2, s_3, s_4) = \begin{cases} 0 & \text{si } s < s_1 \\ g_1(s) & \text{si } s_1 \leq s < s_2 \\ 1 & \text{si } s_2 \leq s < s_3 \\ g_2(s) & \text{si } s_3 \leq s < s_4 \\ 0 & \text{si } s_4 \leq s \end{cases} \quad (5.28)$$

donde g_1 y g_2 son funciones suaves que conectan los valores 0 y 1. La función Mollifier que hemos usado se define como

$$S = \begin{cases} \frac{e^q}{e^q + e^{-q}} & \text{para } s_1 < s < s_2, \quad s_3 < s < s_4 \\ 1 & \text{para } s_2 < s < s_3 \end{cases}$$

donde

$$q = \frac{(\xi - 1/2)}{\max[\xi(1 - \xi), 10^{-306}]},$$

y

$$\xi = \begin{cases} \frac{s}{s_2 - s_1} & \text{para } s_1 < s < s_2 \\ \frac{s_3 - s}{s_3 - s_4} & \text{para } s_3 < s < s_4 \end{cases}$$

Esta función se muestra en la figura 5.1 y es usada para modificar la ecuación

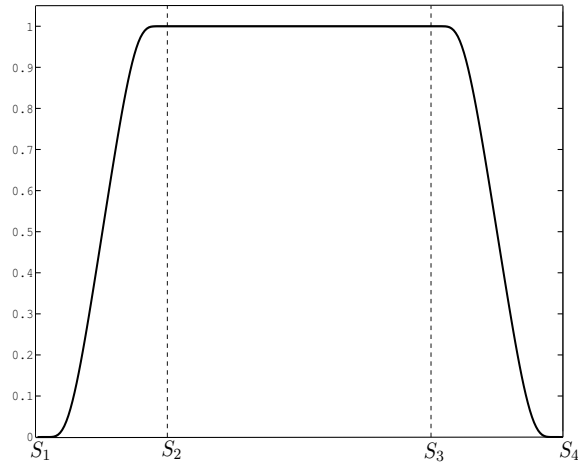


Figura 5.1: La función Mollifier

(5.21) de la siguiente manera

$$U_t + U U_y + \left(\alpha + 2 \frac{\dot{\Gamma}}{\Gamma} \right) U = S(y; y_c, y_a, y_b, y_d) G(y) \quad (5.29)$$

donde

$$\begin{aligned} G(y) = & \left(\frac{\gamma}{\Gamma} \right)^2 c (B - (1 - \mu) B_a - \mu B_b) - \\ & - \frac{\gamma}{\Gamma} \left((1 - \mu) (\alpha - \alpha_a) \dot{a} + \mu (\alpha - \alpha_b) \dot{b} \right) - \\ & - \left(\frac{\gamma}{\Gamma} \right)^2 c (F - (1 - \mu) F_a - \mu F_b) . \end{aligned} \quad (5.30)$$

Nuevamente, dado que hemos modificado la ecuación (5.21), solamente fuera del intervalo $[y_a, y_b]$, la solución en el dominio de interés no cambia. El objetivo de aplicar la función Mollifier al miembro derecho de la ecuación (5.30), es para garantizar que ésta se aproxime a cero suavemente en los puntos extremos del dominio de integración $[y_c, y_d]$ y además, sea igual a cero fuera de él. Finalmente, aplicamos también la función Mollifier a la velocidad inicial $U_0(y)$, así que en lugar de usar U_0 como condición inicial usamos $S(y; y_c, y_a, y_b, y_d)U_0(y)$. Como antes, dado que la condición inicial dentro del dominio de interés $[y_a, y_b]$ no cambia, la solución dentro de este dominio tampoco cambia. Todas estas modificaciones dan como resultado que la densidad de carga R y la velocidad U en coordenadas móviles tiendan a cero suavemente en los puntos extremos del dominio de integración y se anulen fuera de él.

5.4.1. Discretización espacial.

Todas estas modificaciones que hemos hecho nos garantizan que podemos extender periódicamente el problema y buscar soluciones para las ecuaciones (5.20), (5.29), (5.22) y (5.23) usando los Métodos Espectrales de Fourier. Para este fin, discretizamos el espacio físico sobre una malla de N nodos equiespaciados,

$$y_i = i \frac{\pi}{N}, \quad i = 1, \dots, N.$$

La parte físicamente relevante de la solución corresponde a los nodos y_i con i entre $N/4$ y $3N/4$. Análogamente, discretizamos la densidad transformada ($R_i = R(y_i, t)$, $i = 1, \dots, N$) y la velocidad transformada ($U_i = U(y_i, t)$, $i = 1, \dots, N$). Así tenemos que los vectores \mathbf{R} y \mathbf{U} tienen dimensión N y contienen los valores de las densidades de carga y las velocidades transformadas en los N nodos de la discretización. Por lo tanto, las ecuaciones (5.20), (5.29), (5.22) y (5.23) son discretizadas en un conjunto de $2N + 4$ ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{f}(\mathbf{z}, \mathbf{y}, t) \quad (5.31)$$

donde

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{U} \\ a \\ b \\ \dot{a} \\ \dot{b} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

y los elementos del vector \mathbf{f} están dados por el lado derecho de las ecuaciones (5.20)-(5.23), esto es,

$$f_i = -\frac{\partial(z_i z_{i+N})}{\partial y}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} f_{i+N} = & -z_{i+N} \frac{\partial z_{i+N}}{\partial y} + \frac{c\gamma^2 (B - (1-\mu)B_a - \mu B_b)}{(z_{2N+2} - z_{2N+1})^2} \\ & - \left(\alpha + 2 \frac{z_{2N+4} - z_{2N+3}}{z_{2N+2} - z_{2N+1}} \right) z_{i+N} \\ & - \frac{\gamma ((1-\mu)(\alpha - \alpha_a) z_{N+3} + \mu(\alpha - \alpha_b) z_{2N+4})}{z_{2N+2} - z_{2N+1}} \\ & - \frac{c\gamma^2 (F - (1-\mu)F_a - \mu F_b)}{(z_{2N+2} - z_{2N+1})^2} \\ i = & 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$f_{2N+1} = z_{2N+3} \quad (5.35)$$

$$f_{2N+2} = z_{2N+4} \quad (5.36)$$

$$f_{2N+3} = \frac{c\gamma}{z_{2N+2} - z_{2N+1}} (B_a - F_a) - \alpha_a z_{2N+3} \quad (5.37)$$

$$f_{2N+4} = \frac{c\gamma}{z_{2N+2} - z_{2N+1}} (B_b - F_b) - \alpha_b z_{2N+4} \quad (5.38)$$

5.4.2. Derivación espectral y convolución usando FFT.

Al igual que cuando resolvimos el modelo 2D, el cálculo del lado derecho del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (5.33)-(5.38), tiene dos términos que requieren cálculos muy precisos: las derivadas espaciales y la convolución. Hemos calculado ambos términos usando métodos espectrales. Para calcular las derivadas espaciales usamos la diferenciación espectral de Fourier mediante la Transformada Rápida de Fourier (FFT) definida previamente en el capítulo 2 en (2.14), esto es,

$$\frac{d\mathbf{f}}{dy} = \Re [\mathcal{F}^{-1} \{i w \mathcal{F}(\mathbf{f})\}],$$

donde \mathcal{F} y \mathcal{F}^{-1} representan la FFT y su inversa respectivamente, \mathbf{f} es un vector conocido y w es el vector de onda.

Por ejemplo, el término $z_{i+N} \partial z_{i+N} / \partial y$ [30], que aparece en la ecuación (5.34), se calcula como

$$\left(\frac{z_{i+N}^2}{2} \right)_y = \Re \left[\mathcal{F}^{-1} \left\{ i w \mathcal{F} \left(\frac{z_{i+N}^2}{2} \right) \right\} \right]$$

Al usar la FFT para calcular las derivadas espaciales, se consigue una elevada precisión a un coste computacional bajo.

La ecuación (5.34) contiene la convolución de la densidad transformada, R , con el núcleo $K = 1/y$ (5.24). Sin embargo, $R(y)$ solamente está definida en el dominio $[y_c, y_d] \equiv [0, \pi]$. En la fórmula (5.24), $y \in [0, \pi]$ e $y' \in [0, \pi]$, así que $(y - y') \in [-\pi, \pi]$. Como queremos usar la FFT para calcular la convolución, definimos una nueva $R(y)$ como

$$R(y, t) = \begin{cases} R(y, t) & \text{para } 0 < y < \pi \\ 0 & \text{para } -\pi < y < 0 \end{cases}$$

y extendemos periódicamente esta función de modo que $R(y, t)$ es periódica en y con periodo 2π . Análogamente, definimos el núcleo de la convolución como $K(y) = 1/y$, para $-\pi < y < \pi$, y también lo extendemos periódicamente. De este modo ambas, R y K , son periódicas con periodo 2π . Entonces, para $0 < y < \pi$ tenemos:

$$\begin{aligned} B(y, t) &= \text{v.p.} \int_{-\pi}^{\pi} K(y - y') R(y', t) dy' = \text{v.p.} \int_{-\pi}^{\pi} K(y - y') \sum_{n=-\pi}^{\pi} \hat{R}_n e^{iny'} dy' \\ &= \sum_{n=-\pi}^{\pi} \hat{R}_n \left[\text{v.p.} \int_{-\pi}^{\pi} K(y - y') e^{-in(y-y')} dy' \right] e^{iny} = \sum_{n=-\pi}^{\pi} \hat{R}_n \hat{K}_n e^{iny} \end{aligned}$$

donde \hat{K}_n son los coeficientes de la transformada de Fourier del núcleo, que podemos calcular exactamente como,

$$\begin{aligned} \hat{K}_n &= \text{v.p.} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{y'} e^{-iny'} dy' = \text{v.p.} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos ny'}{y'} dy' - i \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin ny'}{y'} dy' \right] \\ &= \text{v.p.} \left[-2i \int_0^{\pi} \frac{\sin ny'}{y'} dy' \right] \\ &= -2i \int_0^{n\pi} \frac{\sin s}{s} ds \end{aligned} \tag{5.39}$$

Por lo tanto, el valor exacto de los coeficientes es $\hat{K}_n = -2i \text{SinInt}(n\pi)$, donde la función seno integral (SinInt) se define como,

$$\text{SinInt}(u) = \int_0^u \frac{\sin(t)}{t} dt.$$

Así, la convolución se calcula usando la FFT de acuerdo a la fórmula (2.15) definida en el capítulo 2 como

$$B = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \hat{K} \cdot \hat{R} \right\}, \quad (5.40)$$

donde $\hat{R} = \mathcal{F}(R)$. Nótese que, aunque el núcleo $K(y)$ decae muy despacio, como podemos calcular los coeficientes de la transformada de Fourier usando (5.39), y dado que los coeficientes de Fourier de R sí decaen muy rápidamente, podemos calcular $B(y)$ con precisión espectral.

Siguiendo un procedimiento análogo, es posible calcular la convolución de K con N_h definida en (5.25).

5.4.3. Algoritmo para la evolución temporal.

Como ya mencionamos anteriormente, una vez calculada la parte derecha del sistema (5.31), que contiene las derivadas espaciales y las convoluciones, nos queda un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para la variable temporal. Para resolver este sistema hemos usado un esquema de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4), con un paso de tiempo $\Delta t = 0.05$. De esta manera la convergencia temporal es de cuarto orden [92]. El esquema correspondiente al sistema (5.31) es [24]

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 &= \mathbf{f}(\mathbf{z}^n, t_n), \\ \mathbf{d}_2 &= \mathbf{f}\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{d}_1, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{d}_3 &= \mathbf{f}\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{d}_2, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{d}_4 &= \mathbf{f}\left(\mathbf{z}^n + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{d}_3, t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \\ \mathbf{z}^{n+1} &= \mathbf{z}^n + \frac{1}{6}\Delta t [\mathbf{d}_1 + 2\mathbf{d}_2 + 2\mathbf{d}_3 + \mathbf{d}_4] \end{aligned} \quad (5.41)$$

Con este esquema, al ser de cuarto orden, se preserva la alta precisión que se logra con los métodos espectrales en la solución de la parte espacial del problema.

5.5. Resultados numéricos.

5.5.1. Resultados del modelo 1D completo.

En esta sección presentamos los resultados numéricos de la solución del modelo (5.10)-(5.11), obtenidos mediante la resolución del sistema en coordenadas comóviles (5.20)-(5.23). Sin embargo, presentaremos los resultados en las variables dimensionales del modelo 1D de ondas planas (5.7)-(5.8), a fin de comparar nuestros resultados con los que aparecen en la referencia [1]. Para transformar los resultados de coordenadas comóviles a coordenadas cartesianas se usan las fórmulas (5.26) y (5.27). Las condiciones iniciales para la distribución de la densidad de electrones y la velocidad son las mismas que utilizamos en la solución del modelo bidimensional en el capítulo 3. De acuerdo a [1], estas son

$$N_e(x, t = 0) \equiv N_0 \exp(-x^2/2\Lambda^2) \quad (5.42)$$

$$u(x, t = 0) = u_0 = 4 \times 10^5 \text{ ms}^{-1} \quad (5.43)$$

donde $N_0 = qN_s$ y $N_h(x) = N_e(x, t = 0)$ y demás parámetros de la tabla (5.1).

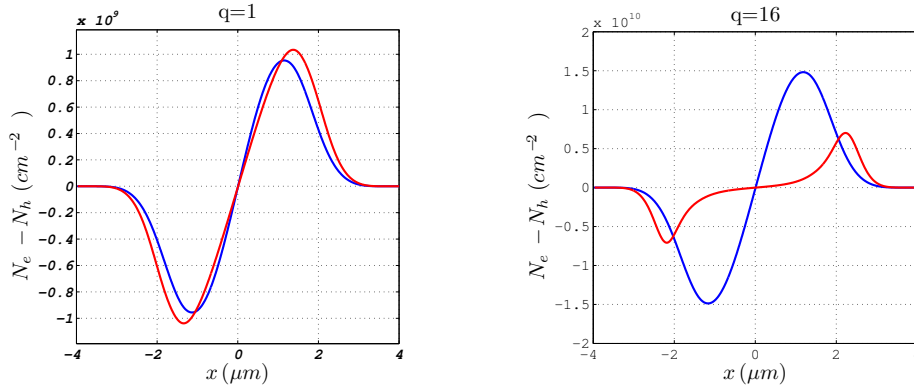


Figura 5.2: Cambio relativo en la densidad de distribución de electrones $N_e(x, t) - N_h(x)$ (en cm^{-2}) para los tiempos $t = 80$ fs (azul) y $t = 1.5$ ps (rojo). Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$.

La figura (5.2) muestra el cambio relativo en el perfil de la densidad de electrones $N_e(x, t) - N_h(x) = N_e(x, t) - N_e(x, 0)$, para los tiempos, $t = 80$ fs (azul), y $t = 1.5$ ps (rojo). A la izquierda mostramos el caso con un sólo pozo cuántico ($q = 1$), y a la derecha el caso con dieciséis pozos cuánticos ($q = 16$).

Inicialmente los electrones se mueven balísticamente con velocidad inicial u_0 , mientras que el cambio en la distribución de la densidad se comporta como $(-u_0 t \partial N_e(x, 0) / \partial x)$. Esto conduce a un exceso de carga para $x > 0$ y un defecto de carga para $x < 0$. El exceso de carga se mueve lejos del origen mientras que crece para tiempos pequeños y decrece para tiempos más largos. Nótese que en el caso $q = 16$ el exceso de carga está cerca del origen durante la mayor parte del dominio y hay dos puntos de exceso y defecto de carga ubicadas aproximadamente en ± 2 . Este comportamiento se puede apreciar

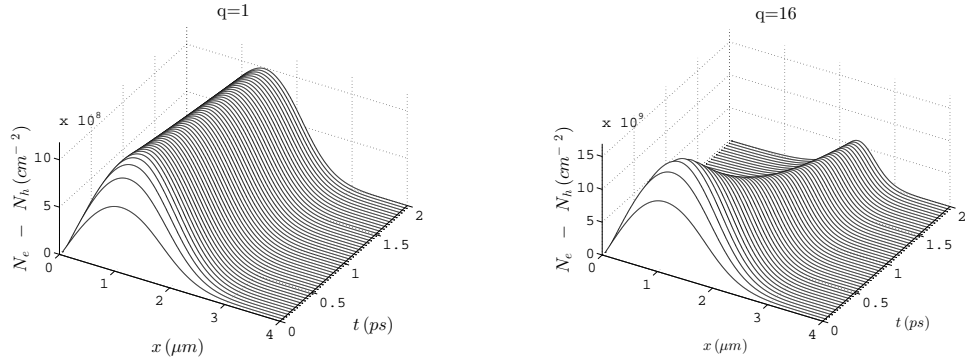


Figura 5.3: Cambio relativo en la densidad de distribución de electrones $N_e(x, t) - N_h(x)$ (en cm^{-2}) como una función del espacio x y el tiempo t . Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$.

claramente en la Figura 5.3 que muestra la evolución en el tiempo del cambio relativo de la distribución de la densidad de electrones (solamente mostramos la región con exceso de carga, $x > 0$). Nótese que en el caso $q = 16$ (derecha) el exceso de carga se mueve más lejos del origen que en el caso $q = 1$ (izquierda). Incluso la cantidad total de exceso de carga decrece más rápido en el caso $q = 16$.

La figura 5.4 muestra la correspondiente evolución de la velocidad. La velocidad inicial es constante pero el término disipativo $(-\alpha u)$ en la ecuación (5.11) provoca una disminución de la velocidad conforme transcurre el tiempo. Al mismo tiempo, la velocidad de los electrones varía, mientras que la de los agujeros se puede despreciar por ser estos más pesados. Por lo tanto, el campo eléctrico producido por los electrones no está equilibrado por el producido por los huecos, lo que resulta en una fuerza neta debido a la diferencia entre el término de convolución para los electrones $(K * N_e)$, y el de los huecos $(K * N_h)$. Para tiempos largos, la velocidad en la región central

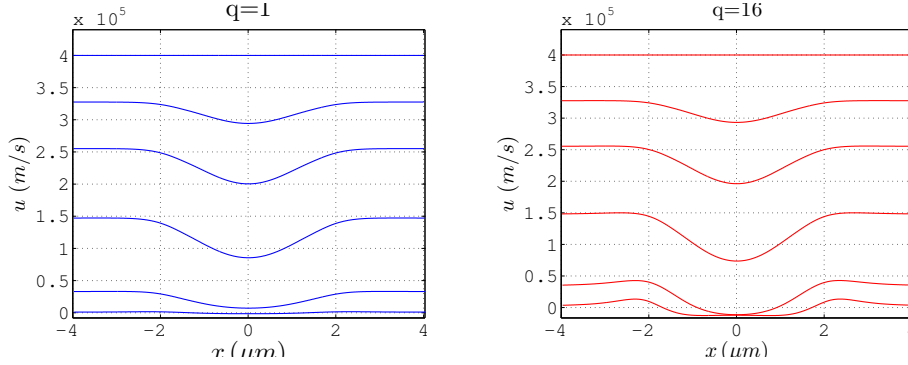


Figura 5.4: Velocidad $u(x, t)$ como una función del espacio x . De arriba hacia abajo las curvas corresponden a los tiempos $t = 0; 0.016; 0.036; 0.08; 0.2; 0.5$ ps. Izquierda: $q = 1$. Derecha: $q = 16$.

se aproxima a cero y solamente la carga en la vecindad de la frontera del dominio de carga tiene una velocidad distinta de cero y positiva. Nótese que para $q = 16$ el comportamiento es similar, pero la velocidad en la región central se aproxima a cero mucho más rápido que en el caso $q = 1$. Además, la velocidad en la región de la frontera es mayor en el caso $q = 16$.

Es interesante calcular, también para este modelo 1D, el desplazamiento medio de la distribución de la densidad de electrones $\langle x(t) \rangle$, definido en [1], de acuerdo a la fórmula (3.51) del capítulo 3. La versión de dicha fórmula para el modelo simplificado 1D es

$$\langle x(t) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x N_e(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} N_e(x, 0) dx} \quad (5.44)$$

La figura 5.5 muestra la evolución en el tiempo de $\langle x(t) \rangle$. Para tiempos cortos existe un rápido desplazamiento de la carga hasta que se alcanza un máximo. Entonces, el desplazamiento de la mancha disminuye a una escala de tiempo mucho más lenta. La línea roja continua es la correspondiente al caso $q = 16$ y demás parámetros que se muestran en la tabla 5.1. La línea azul continua muestra el efecto de disminuir el número de pozos cuánticos ($q = 4$). Nótese que para tiempos cortos, el desplazamiento es muy parecido al caso con $q = 16$ y el desplazamiento máximo es muy similar en ambos casos. Sin embargo, después de que se alcanza el máximo, el desplazamiento

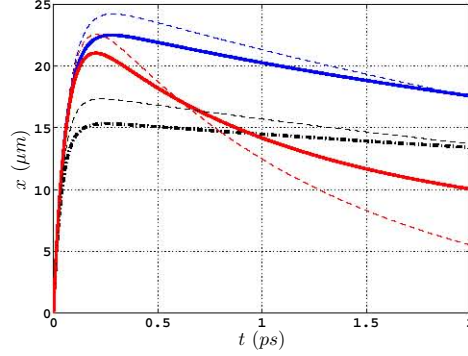


Figura 5.5: Desplazamiento medio de la mancha $\langle x(t) \rangle$ (línea continua) y desplazamiento en la aproximación rígida de la mancha $\langle x_{rsa} \rangle$ (líneas discontinuas), como una función del tiempo. Para $q = 16$, $\tau_{eh} = 150$ fs (rojo); $q = 4$, $\tau_{eh} = 150$ fs (azul) y $q = 4$, $\tau_{eh} = 50$ fs (negro).

de la mancha disminuye mucho más lentamente en el caso $q = 4$. La línea negra continua muestra el efecto de la disminución de la resistencia debido a las colisiones entre los electrones y huecos ($\tau_{eh} = 50$ fs). Nótese que en este caso el desplazamiento máximo es menor y la escala de tiempo de retorno al equilibrio es mucho más lenta que en los otros casos. También se muestra en la figura 5.5 (líneas discontinuas), las correspondientes gráficas del “rigid spot approximation” $\langle x_{rsa} \rangle$, que habíamos presentado en la correspondiente figura 3.12 del desplazamiento medio para el modelo bidimensional en el capítulo 3. Para valores grandes de q , la curva de $\langle x(t) \rangle$ se aleja de la respectiva para $\langle x_{rsa} \rangle$. Sin embargo, ambas alcanzan su máximo en aproximadamente el mismo instante y los valores máximos son similares.

Finalmente, la figura 5.6 muestra la evolución de los límites $a(t)$ y $b(t)$ del dominio de la carga definidos por las ecuaciones (5.14) y (5.15). Nótese que inicialmente ambos a y b se mueven con la misma velocidad que es de orden unidad. Sin embargo, después de un tiempo transitorio corto, continúan en movimiento a una velocidad mucho más lenta. Este resultado valida las coordenadas comóviles que hemos usado, mediante el cambio de variables (5.16)-(5.17).

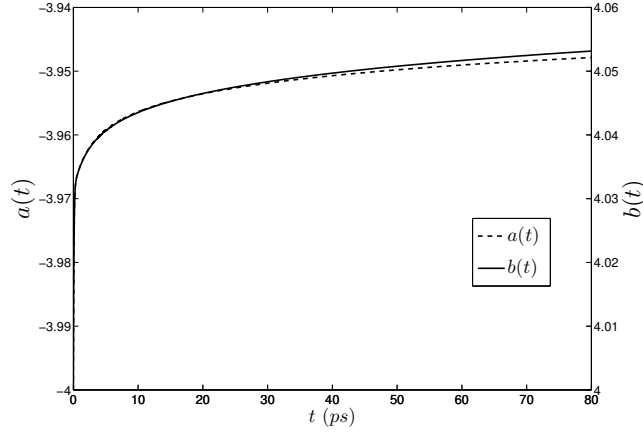


Figura 5.6: Evolución en el tiempo de los límites del soporte del dominio $a(t)$, $b(t)$.

5.5.2. Comparación de los resultados entre los modelos 1D y 2D.

Las figuras 5.2 y 5.5 pueden ser comparadas con las figuras 3.11 y 3.12 del capítulo 3, las cuales, tal y como mencionamos, son reproducciones de las correspondientes figuras 2 y 4 de la referencia [1], pero calculadas a partir de los datos generados por las simulaciones numéricas, utilizando el método espectral.

Nótese que existe una muy buena concordancia tanto cualitativa como cuantitativa entre estas figuras, aunque estemos usando un modelo de ondas planas unidimensional, mientras que el modelo que se resuelve en el capítulo 3 y en [1], es totalmente bidimensional. Esta excelente concordancia se debe a que los patrones de la dinámica de $N_e - N_h$, del modelo bidimensional, tienen una forma bastante unidimensional, que es especialmente notable en el caso $t = 1.5$ ps, $q = 16$ (segunda fila derecha de la figura 3.11).

Cabe señalar además, que los métodos espectrales que hemos implementado para resolver el sistema de ecuaciones (5.10)-(5.11), hacen posible obtener soluciones para tiempos largos.

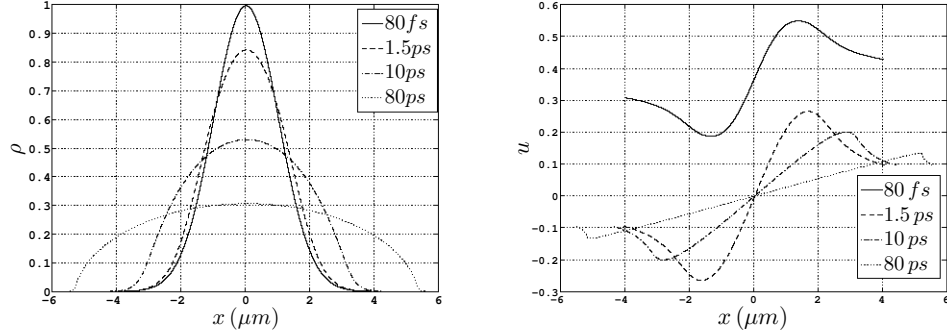


Figura 5.7: Solución numérica del sistema (5.10)-(5.11) para el caso $N_h = 0$, en tiempos 80 fs (línea continua), 1.5 ps (línea discontinua), 10 ps (línea punteada-discontinua) y 80 ps (línea de puntos). Izquierda: densidad de electrones adimensional ρ . Derecha: velocidad adimensional u .

5.5.3. Solución para tiempos largos.

Un caso interesante consiste en analizar el comportamiento de este modelo unidimensional (5.10)-(5.11), cuando $N_h = 0$ ($q = 1$), esto es, cuando sólo consideramos el campo eléctrico debido a los electrones. Este problema también será relevante en los casos en que se produce un exceso de electrones. La figura 5.7 muestra la distribución de la densidad de carga adimensional (izquierda) y la velocidad adimensional (derecha) en cuatro pasos de tiempos seleccionados. Para tiempos cortos, la velocidad inicial ($u_0(x) = 1$), se hace negativa a un ritmo muy rápido para $x < 0$ y se hace positiva para $x > 0$. Este comportamiento se debe a la fuerza repulsiva que se crea cuando sólo se consideran los electrones.

La figura 5.8 muestra la densidad de carga, ρ , (izquierda) y la velocidad u (derecha) en los tiempos $t = 50$ ps (línea continua), $t = 70$ ps (línea discontinua) y $t = 90$ ps (línea punteada-discontinua) para el caso $N_h = 0$. Las figuras 5.7 y 5.8 muestran que a medida que avanza el tiempo, el valor absoluto de la velocidad de los electrones decrece. Así, para tiempos largos, la ecuación (5.11) implica que $c(K * \rho) = \alpha u$, cuando $N_h = 0$.

A fin de obtener expresiones analíticas para la densidad de carga, ρ , y la velocidad, u , que sean válidas en el límite $t \rightarrow \infty$, hacemos $U = 0$ en la ecuación (5.21), obteniendo la siguiente relación,

$$B_\infty = (1 - \mu) B_{a\infty} + \mu B_{b\infty} \quad (5.45)$$

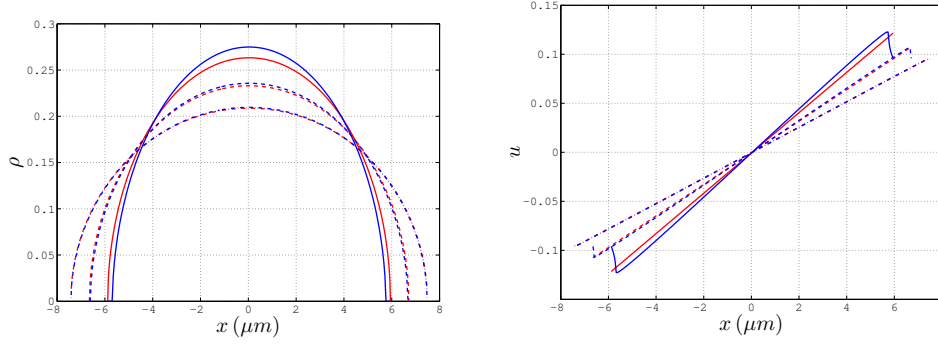


Figura 5.8: Densidad de electrones adimensional ρ (izquierda) y velocidad adimensional u (derecha) para los tiempos $t = 50$ ps (línea continua), $t = 70$ ps (línea discontinua), $t = 90$ ps (línea punteada-discontinua) para el caso $N_h = 0$. Curva azul: Solución numerica. Curva roja: Solución asintótica.

donde $B_\infty = B(y, \infty)$, $B_{a\infty} = B(y_a, \infty)$, $B_{b\infty} = B(y_b, \infty)$. Nótese que μ es lineal en y , y por lo tanto, la convolución,

$$B_\infty(y) = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y - y'} R(y', \infty) dy' = \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y - y'} R_\infty(y') dy',$$

tiene que ser una función lineal de y . Por tanto, la convolución en coordenadas fijas también debe ser una función lineal de x ,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (K * \rho)(x, t) = \frac{\gamma}{\Gamma} B_\infty = \frac{8\mathcal{C}}{(b-a)^2} (x - \bar{x}) \quad a \leq x \leq b \quad (5.46)$$

donde $\bar{x} = (a+b)/2$ es el punto medio del soporte compacto (sección 5.3) y \mathcal{C} es carga total, que está dada por

$$\mathcal{C} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\infty(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, 0) dx$$

debido a que de la ecuación (5.10), se deduce que la carga total $\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx$ se conserva en el tiempo.

En el Apéndice B mostramos que a fin de que la convolución $(K * \rho)$ sea lineal en x , es necesario que ρ sea una semi-elipse centrada en \bar{x} . Así se tiene que,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(x, t) = \frac{4\mathcal{C}}{\pi(b-a)} \sqrt{1 - \frac{4}{(b-a)^2} (x - \bar{x})^2} \quad a \leq x \leq b \quad (5.47)$$

Finalmente,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = \frac{c}{\alpha} \lim_{t \rightarrow \infty} (K * \rho)(x, t) = \frac{8 c \mathcal{C}}{\alpha (b - a)^2} (x - \bar{x}) \quad a \leq x \leq b \quad (5.48)$$

Las curvas correspondientes a las fórmulas asintóticas (5.47)-(5.48) se muestran en la figura 5.8 (curva roja). Para $t > 80$ ps, la solución asintótica coincide con la solución numérica (curva azul) de las ecuaciones (5.10)-(5.11). Nótese que ambas curvas (azul y roja) se superponen una sobre la otra en el caso $t = 90$ ps.

5.6. Conclusiones.

En este capítulo hemos derivado un modelo unidimensional a partir del modelo hidrodinámico bidimensional de la dinámica de las corrientes generadas mediante inyección óptica, propuesto por Sherman *et al.* [1], mediante una aproximación con ondas planas. El modelo que obtenemos, aunque es más sencillo, contiene la física principal del modelo hidrodinámico 2D.

Para resolver numéricamente este modelo unidimensional, hemos escrito las ecuaciones en un sistema de coordenadas comóviles de manera que el dominio de soporte sea fijo, y poder resolverlo usando métodos espectrales.

El método numérico que hemos construido es muy preciso y capaz de calcular soluciones para tiempos largos. Los resultados numéricos muestran, no solo una concordancia cualitativa, sino también cuantitativa con la solución del modelo bidimensional completo que resolvimos numéricamente en el capítulo 3, y con los resultados de la referencia [1]. Para tiempos largos, hemos derivado una solución asintótica que guarda una fuerte concordancia con los resultados numéricos. Las fuerzas de Coulomb de largo alcance junto a la no linealidad de las ecuaciones, producen complejos patrones de carga y densidad de corriente.

Capítulo 6

Método de partículas aplicado al modelo 1D.

6.1. Introducción.

La ecuación (5.11) puede escribirse en forma conservativa, como

$$u_t + f(u)_x = g(x, u, t) \quad (6.1)$$

donde $f(u) = u^2/2$ y $g(x, u, t) = c(K * \rho) - \alpha u - c(K * N_h)$.

Nótese que, el lado izquierdo es precisamente la ecuación de Burgers sin viscosidad con flujo $f(u) = u^2/2$. Como es conocido [51], en las soluciones de este tipo de ecuaciones, se pueden generar discontinuidades (choques) en tiempo finito. Resulta interesante entonces, analizar si las soluciones de las ecuaciones del modelo simplificado 1D (5.10)-(5.11) pueden generar ondas de choques o discontinuidades que denominamos “wave breaking”. Esto es, encontrar soluciones para las ecuaciones en las que, aun cuando se parta de condiciones iniciales suaves, se desarrollen singularidades en tiempo finito. Y si las singularidades aparecen, averiguar si es posible continuar pasado este tiempo, al menos con soluciones en sentido débil. También queremos analizar si el término de la convolución del miembro derecho de la ecuación (6.1) ayuda a evitar que se generen estas ondas de choque en las soluciones del problema.

Sin embargo, para éste análisis no es útil el uso de los métodos espectrales ya que, como hemos visto en los capítulos anteriores, estos métodos suponen que las funciones son suficientemente suaves, periódicas o extendibles periódicamente [23], mientras que el análisis que queremos hacer requiere por un

lado, imponer condiciones iniciales discontinuas, y que a la vez nos permita observar la formación de choques. Aunque en la actualidad es posible obtener soluciones débiles para este tipo de problemas con métodos espectrales [20], sería poco factible ya que, las soluciones tienden a presentar inestabilidades en tiempos muy anteriores a donde ocurren los choques [38]. En su lugar, para hacer el análisis, consideramos que es más adecuado un método de partículas basado en una interpretación Lagrangiana del espacio [52]. Con estos métodos, las discontinuidades que aparecen tanto en las condiciones iniciales como en las soluciones no afectan el resultado de las mismas.

6.1.1. Organización del capítulo.

El contenido de este capítulo está organizado de la siguiente manera:

En la sección 6.2 exponemos la formulación Lagrangiana correspondiente al modelo (5.10)-(5.11), quitando el término de convolución con N_h . En la sección 6.3 se explica el método numérico de partículas que se ha implementado para resolver el modelo. En la sección 6.4 se expone un análisis del “wave breaking” que se produce en la solución del modelo como consecuencia de la ausencia del término de la convolución en la ecuación de la velocidad, y cómo la convolución logra parar el desarrollo de choques. Finalmente, en la sección 6.5 se exponen las conclusiones de este capítulo.

6.2. Formulación.

Para hacer este análisis consideraremos el caso $N_h = 0$ que ya estudiamos en la sección (5.5.3) del capítulo 5. Por tanto, las ecuaciones (5.10)-(5.11) pueden escribirse como

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0, \quad (6.2)$$

$$u_t + uu_x = -\alpha u + f \quad (6.3)$$

donde ρ representa la distribución de la densidad de los electrones, u la velocidad y $f = c(K * \rho)$ el término de la convolución del núcleo $K(x) = 1/x$ con la densidad ρ .

El análisis que planteamos en este capítulo está motivado por el hecho de que la ecuación (6.3), tal y como está definida, puede desarrollar pendientes negativas infinitas en un tiempo finito, aunque partamos de condiciones iniciales suaves, esto es, $u_x(x_c, t_c) = -\infty$ en algún punto del espacio $x = x_c$, con

$0 < t_c < \infty$. Más allá de este tiempo crítico, las soluciones dejan de existir como solución clásica. Sin embargo, por lo menos para algunos contextos físicos, la solución puede continuar más allá de este tiempo como una solución débil [28, 34, 51, 90].

Para resolver el sistema (6.2)-(6.3) mediante un método de partículas, es necesario escribirlo desde un punto de vista Lagrangiano, es decir siguiendo las trayectorias de las partículas. De esta manera la velocidad será

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t). \quad (6.4)$$

Cuando distintas trayectorias de las partículas convergen a una única ubicación, la densidad ρ tiende al infinito y entonces se produce el “wave breaking”. A lo largo de la trayectoria de la partícula (6.4) y aplicando la definición de la derivada material [26, 52, 73]

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt},$$

sobre las ecuaciones (6.2) y (6.3) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho v \quad (6.5)$$

$$\frac{du}{dt} = -\alpha u + f \quad (6.6)$$

$$\frac{dv}{dt} = -v^2 - \alpha v - \alpha_x u + f_x \quad (6.7)$$

donde $v = u_x$ y la ecuación (6.7) se obtiene de calcular la derivada parcial ∂_x de (6.3).

A causa del término no lineal v^2 en (6.7), si v es negativa en $t = 0$ y su valor absoluto es lo suficientemente grande, entonces $v \rightarrow -\infty$ en un tiempo finito t_∞ , es decir es posible que se produzca “wave breaking”.

6.3. Método de partículas.

Como se puede observar, el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (6.5)-(6.7), es el sistema Lagrangiano correspondiente a las ecuaciones (6.2) y (6.3). Para resolver éste sistema hemos usado un método de partículas, cuyas características generales se explicaron brevemente en la sección (2.3.2.2) del

capítulo 2. Dada la formulación Lagrangiana que hemos hecho del sistema, sólo utilizaremos el concepto de seguimiento de la partícula.

Para discretizar las variables x y u , una estrategia sencilla es poner M partículas equiespaciadas sobre el intervalo de interés en posiciones x_1, \dots, x_M y luego asignar a cada partícula una velocidad $u_i = u_0(x_i)$ [35]. Sin embargo, dado que la evolución de las partículas x no depende de la distancia que hay entre una partícula y otra, pues de acuerdo a (6.4) su posición depende de su velocidad u en cada instante, es posible escoger una distribución inicial de las partículas que no sea equiespaciada, poniendo más partículas en las zonas que dan problemas, como por ejemplo las discontinuidades, y menos partículas donde la velocidad es suave. Igualmente, en cada instante de la simulación es posible agregar más partículas atendiendo al mismo criterio.

Luego, el conjunto de M puntos se ordenan de manera que $x_1 < \dots < x_M$. La evolución de la solución se encuentra moviendo cada punto x_i con velocidad $\frac{dx_i}{dt} = u_i$. Por tanto, la ecuación (6.4) y el sistema (6.5)-(6.7) se pueden discretizar en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de la siguiente manera.

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{F}(\mathbf{z}, t), \quad (6.8)$$

con

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} x \\ \rho \\ u \\ v \end{bmatrix}, \quad (6.9)$$

donde los elementos del vector \mathbf{F} son

$$F_i = z_{i+2M} \quad (6.10)$$

$$F_{i+M} = -z_{i+M}z_{i+3M} \quad (6.11)$$

$$F_{i+2M} = -\alpha_i z_{i+2M} + f_i \quad (6.12)$$

$$F_{i+3M} = -(z_{i+3M})^2 - \alpha_i z_{i+3M} - z_{i+2M} \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + \frac{\partial f_i}{\partial x} \quad (6.13)$$

$$i = 1, \dots, M$$

y donde $f_i = c(K * \rho)_i$, con $c = 0.1466$.

A lo largo del camino de la partícula (característica) en cada instante t , la masa entre dos partículas se conserva, lo cual se puede deducir de (5.10), calculando

$$\int \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho u)_x \right) dx = \frac{d}{dt} \int \rho dx = 0 \quad (6.14)$$

es decir, entre dos partículas vecinas x_{i+1} y x_i se tiene que

$$\frac{d}{dt} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \rho dx = 0 \quad (6.15)$$

siempre que $x_i(t)$ y $x_{i+1}(t)$ sean puntos en la trayectoria de la partícula.

Por lo tanto, tomando ρ constante a trozos $\rho(x) = \rho_i$, con $x_i < x \leq x_{i+1}$, se tiene que

$$\rho_i = \rho_{0_i} \frac{dx_0}{x_{i+1}(t) - x_i(t)} \quad (6.16)$$

donde $dx_0 = x_{i+1}(0) - x_i(0)$ y $\rho_{0_i} = \rho(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}, 0)$.

Por otro lado, de (5.9) se tiene que

$$f = c(K * \rho) = c \left[\text{v.p.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x - x'} \rho(x', t) dx' \right] \quad (6.17)$$

Nuevamente, dado que ρ es constante a trozos, podemos calcular la convolución de forma analítica

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x - x'} \rho(x') dx' &= \sum_{i=1}^M \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\rho_i}{x - x'} dx' \\ &= - \sum_{i=1}^M \rho_i \ln(|x - x'|) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$f = -c \sum_{i=1}^M \rho_i \ln \left| \frac{x - x_{i+1}}{x - x_i} \right| \quad (6.18)$$

y

$$f_i = f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$$

Calculando ρ de acuerdo a (6.16) y f de acuerdo a (6.18), no es necesario resolver las ecuaciones para ρ y v en el sistema de ecuaciones ordinarias (6.5)-(6.7). Finalmente el sistema discreto (6.8) se reduce a sólo dos ecuaciones para las variables x y u , con lo cual los elementos del vector \mathbf{F} serán

$$F_i = z_{i+M} \quad (6.19)$$

$$F_{i+M} = -\alpha_i z_{i+M} + f_i \quad (6.20)$$

$$i = 1, \dots, M$$

el cual lo hemos resuelto mediante un esquema de Runge-Kutta de cuarto orden.

Para comprobar que efectivamente el método de partículas, que planteamos aquí, reproduce las soluciones obtenidas con los métodos espectrales, imponemos las condiciones iniciales del modelo 1D sobre ondas planas que estudiamos en la sección 4.4, esto es

$$\rho(x, t = 0) = \exp(-0.5x^2)$$

$$u(x, t = 0) = 1.$$

Luego, la solución numérica del sistema (6.2)-(6.3) para tiempos largos, debe coincidir con la solución asintótica que estudiamos en la sección 4.4.1. En la figura 6.1 se puede ver por un lado que, efectivamente, para tiempos relativamente cortos la solución de ρ , usando el método de partículas (línea continua), coincide con la solución obtenida con métodos espectrales y la figura 6.2 muestra que, para tiempos largos, ambas soluciones (usando método de partículas y espectrales) se aproximan a la solución asintótica (5.47). En otras palabras, con el método de partículas se consigue la misma aproximación que habíamos logrado con los métodos espectrales. Por otro lado, en la

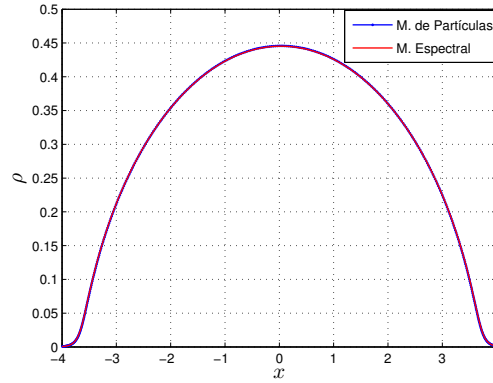


Figura 6.1: Comparación de las soluciones de la ecuación de la distribución de la densidad de electrones: (línea continua) método espectral y (línea discontinua) método de partículas.

figura 6.3 se observa que el método de partículas aproxima muy bien la solución asintótica de la convolución (5.46) para tiempos largos, que presentamos también en la sección 4.4.1 del capítulo anterior.

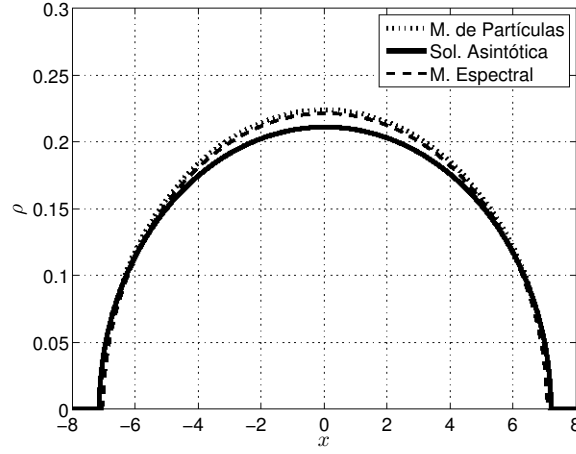


Figura 6.2: Comparación de las soluciones de la ecuación de la distribución de la densidad de electrones: (línea continua) solución asintótica (5.47), (línea discontinua) métodos espectral y (línea punteada) método de partículas.

6.4. Análisis de los resultados.

En esta sección haremos un breve análisis de las soluciones obtenidas con el método de partículas. En primer lugar analizaremos el caso en ausencia del término de la convolución. Esto es, cuando $\alpha > 0$ es una constante y $f = 0$.

Bajo estas condiciones, el sistema (6.5)-(6.7) se puede resolver explícitamente, obteniendo como resultado

$$\rho = \frac{\alpha \rho_0 e^{\alpha t}}{(\alpha + v_0) e^{\alpha t} - v_0}, \quad u = u_0 e^{-\alpha t}, \quad v = \frac{\alpha v_0}{(\alpha + v_0) e^{\alpha t} - v_0}$$

a lo largo del camino de la partícula $x = \zeta + \frac{u_0}{\alpha} (1 - e^{-\alpha t})$, donde $x = \zeta$ es la posición de la partícula en $t = 0$, mientras que $\rho_0 = \rho_0(\zeta) = \rho(\zeta, 0)$, $u_0 = u_0(\zeta) = u(\zeta, 0)$, y $v_0 = v_0(\zeta) = u_x(\zeta, 0)$, que obtenemos de los datos iniciales. Por lo tanto, si $v_0 < -\alpha$, la singularidad ocurre en $t_\infty = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{v_0}{\alpha + v_0} \right)$.

Para comprobar estas soluciones analíticas veremos un ejemplo: Definimos partículas x_i sobre el intervalo $-4 < x < 4$ y utilizamos como

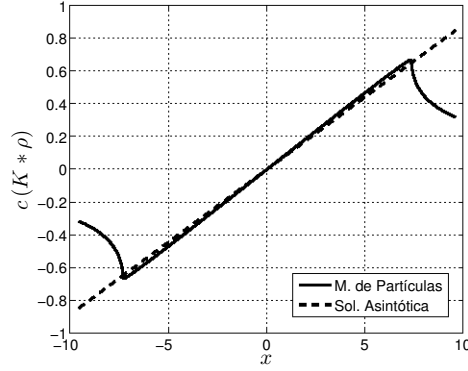


Figura 6.3: Comparación de la solución asintótica de la convolución (5.46) (línea discontinua) y la obtenida con la fórmula (5.33) (línea continua).

condiciones iniciales para la velocidad y la densidad

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < -1/2 \\ -2x & \text{si } -1/2 < x < 1/2 \\ -1 & \text{si } x > 1/2 \end{cases} ; \quad \rho(x, 0) = \exp(-0.5x^2).$$

Como $v = u_x$ se tiene que $v_0 = u_x(x, 0) = -2$, para $-1/2 < x < 1/2$.

En la figura 6.4 se pueden ver las gráficas de las soluciones analíticas en $t = 0.1$, para u y ρ a partir de estas condiciones iniciales, con $\alpha = 1.6$. En esta figura también se aprecian las soluciones numéricas que hemos calculado usando el método de las partículas. Nótese que la concordancia entre ambas soluciones es casi perfecta. En esta figura también se puede apreciar la discontinuidad que empieza a formarse en la distribución de densidad de carga como resultado de la discontinuidad de la derivada de u . En la figura 6.5 se observa la evolución de las soluciones numéricas de u y ρ , mediante el método de partículas. En la secuencia de la izquierda, para u , se observa cómo a medida que las partículas x se mueven, la pendiente de la velocidad decrece, $v = u_x \rightarrow -\infty$ y se genera una discontinuidad de u en el origen. En la parte derecha de la figura, se observa que en la zona central la densidad ρ tiende a infinito en un tiempo finito. En este caso como $v_0 = -2 < -\alpha = -1.6$, la singularidad ocurre en $t_\infty = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{v_0}{\alpha + v_0} \right) \approx 1.0$.

Por tanto, sin el término de convolución se produce una discontinuidad

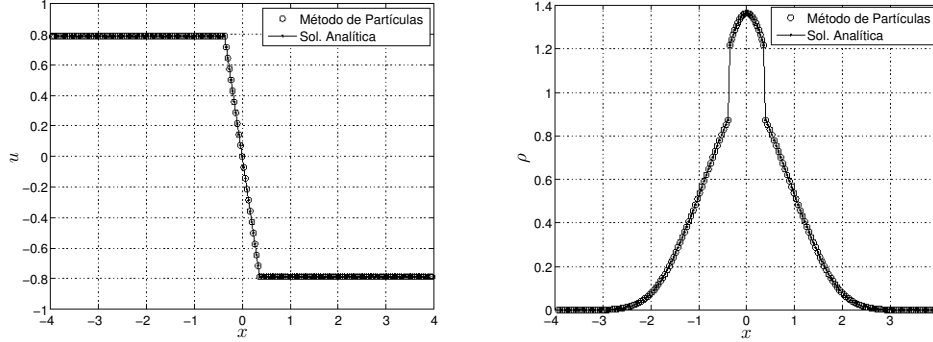


Figura 6.4: Solución analítica (línea sólida punteada) y numérica mediante el método de partículas (línea de ceros) para: (izquierda) u y (derecha) ρ en $t = 0.1$.

en la velocidad en un tiempo finito, cuando la pendiente inicial del perfil de la velocidad en algún punto es suficientemente grande y negativo. Pero, ¿puede el término de la convolución prevenir el desarrollo de dicha discontinuidad? Para contestar esta pregunta, incorporamos al modelo el término de la convolución f que calculamos usando la fórmula (5.33). Partiendo de las mismas condiciones iniciales anteriores, en la figura 6.6 se puede ver la evolución de las soluciones para tres instantes de tiempo, donde se aprecia, efectivamente, que f previene el catastrófico “wave breaking” que se produce en ausencia de la misma. Nótese cómo el perfil de velocidades u se da la vuelta y la pendiente en la zona central pasa de ser negativa a positiva, con lo cual no se genera el choque en el perfil de ρ . El término de la convolución permite obtener soluciones mas allá del instante donde ocurría anteriormente el choque, de modo que para tiempos largos ($t > 5$), aunque todavía aparecen singularidades tanto en ρ como en u , ellas no son suficientemente fuertes como para destruir el concepto de una solución en el sentido clásico.

Con el objeto de demostrar que aunque se parta de condiciones iniciales suaves, la ausencia de la convolución puede producir “wave breaking”, la figura 6.7 presenta una secuencia de soluciones de u y ρ para tres tiempos, cambiando la condición inicial para la velocidad que usamos en el caso anterior, por un perfil gaussiano, esto es

$$u(x, t = 0) = \exp(-2x^2),$$

por lo tanto, se tiene que $v_0 = u_x(x, 0) = -4x \exp(-2x^2)$ y nuevamente

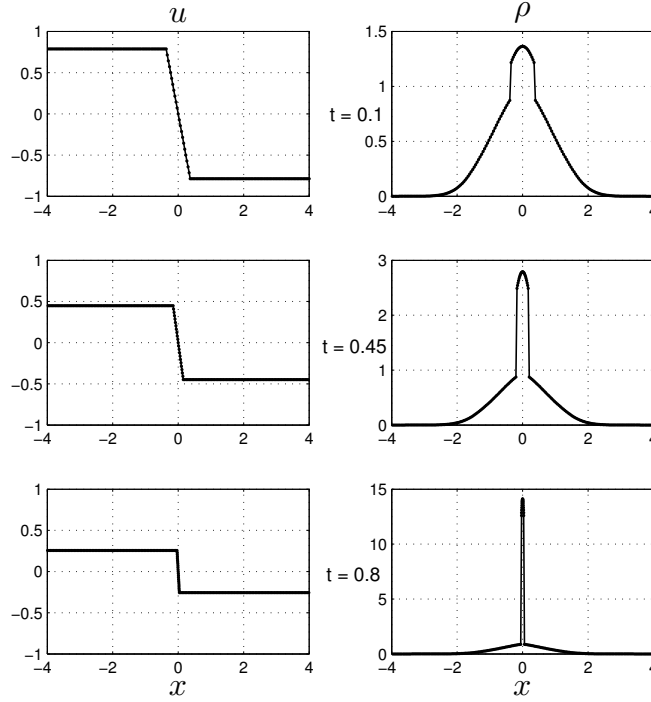


Figura 6.5: Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha) para $t = 0.1, 0.48$ y 0.8 con $\alpha = 1.6$, cuando no se tiene en cuenta el término de la convolución.

tenemos que la pendiente de u es negativa para x cerca del origen, lo cual significa que en la parte derecha de la solución para u puede generarse una onda de choque que termina haciendo que ρ se aproxime a una delta. En este caso si $\alpha = 0.6$, se tiene que $V_0 = \min(v_0) \equiv -1.21 < -\alpha \equiv -0.6$. Por tanto, ocurre una singularidad en $t_\infty = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{V_0}{\alpha + V_0} \right) \approx 1.14$. La figura 6.8 muestra otra secuencia poniendo también como condición inicial para la velocidad el perfil gaussiano, pero ahora hemos incorporado el término de la convolución f . Como se observa, nuevamente la convolución detiene la formación de cualquier inestabilidad en la solución para u , mientras que ρ mantiene un perfil suave, sin ningún tipo de inestabilidad. Nótese que igual que en el caso anterior, la incorporación del término de la convolución permite llegar a tiempos superiores a aquellos donde ocurría el choque en ausencia de la convolución. Finalmente, en la figura 6.9 se observan soluciones para u

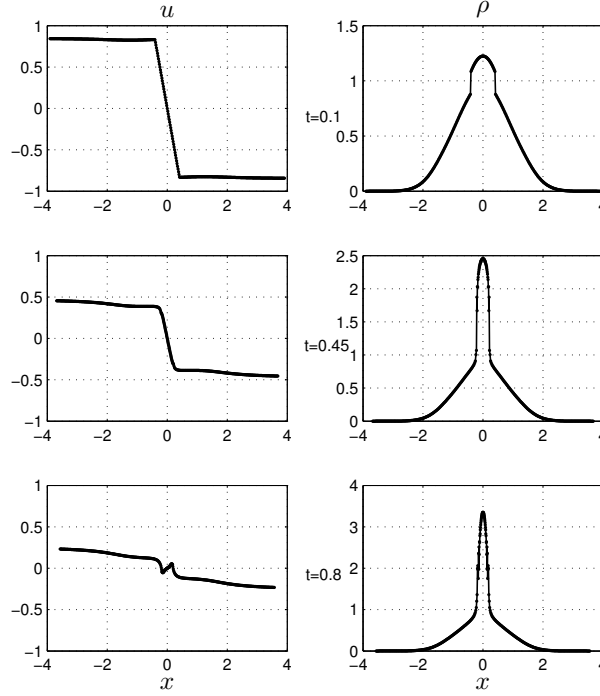


Figura 6.6: Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha) para $t = 0.45, 0.8$ y 5.0 con $\alpha = 1.6$ e incluyendo el término de la convolución.

y ρ para tiempos muy largos $t = 125$. Para estos tiempos las soluciones se aproximan a las soluciones para tiempos largos que obtuvimos en la sección 4.4.1 del capítulo anterior. Esto es u se aproxima a una función constante, mientras que ρ tiende hacia una semi-elipse.

6.5. Conclusiones.

En este capítulo hemos escrito las ecuaciones del modelo unidimensional que describe la dinámica de la distribución de la densidad de electrones mediante una formulación Lagrangiana. Para realizar un estudio sobre la formación de ondas de choque en este modelo, hemos contruido un esquema numérico basado en el método de partículas, el cual nos permite imponer

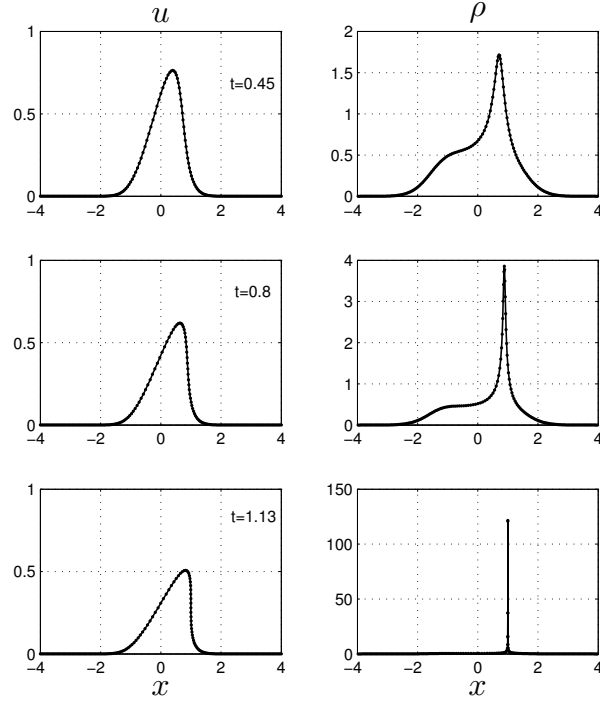


Figura 6.7: Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha), para tiempos $t = 0.1, 0.48$ y 1.13 , a partir de un perfil de velocidad inicial gaussiano, con $\alpha = 0.6$, cuando no se tiene en cuenta el término de la convolución.

condiciones iniciales en las ecuaciones que conducen a la formación de “wave breaking”, que no es posible ver usando métodos espectrales.

A través del análisis de las soluciones, hemos comprobado, por una parte, que en ausencia del término de la convolución, se generan choques que hacen que la densidad tienda a infinito en tiempos finitos y por otra parte, que con la inclusión de este término se logra detener la formación de choques. Finalmente, el término de la convolución permite llegar, a tiempos muy largos, a soluciones similares a las obtenidas en la sección 4.4.1 del capítulo 5.

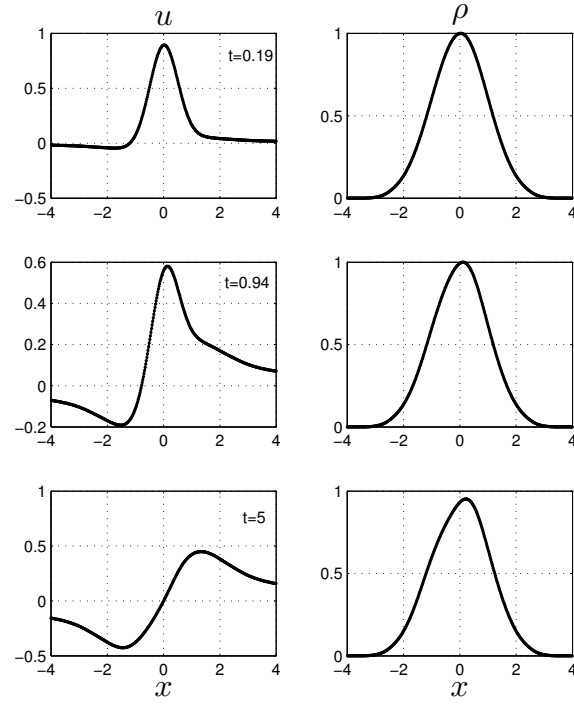


Figura 6.8: Evolución de las soluciones numéricas de: u (izquierda) y ρ (derecha), para $t = 0.19, 0.94$ y 5.0 , a partir de un perfil de velocidad inicial gaussiano, con $\alpha = 0.6$ e incluyendo el término de la convolución.

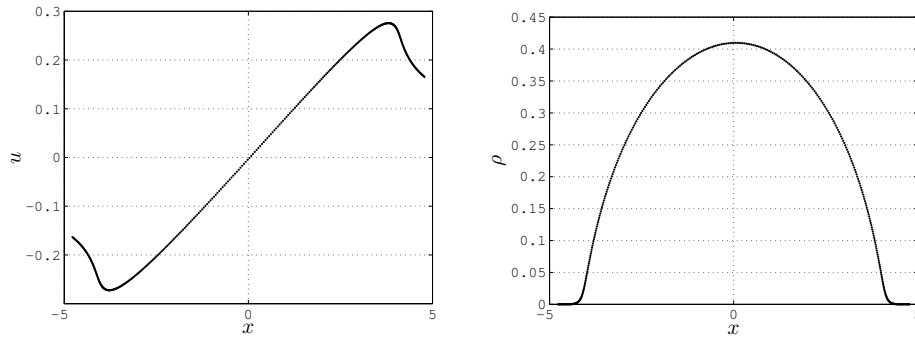


Figura 6.9: Soluciones para tiempos largos ($t = 125$ unidades adimensionales) de: u (izquierda) y ρ (derecha), partiendo de una condición inicial de la velocidad con perfil gaussiano e incluyendo el término de la convolución.

Capítulo 7

Método RBF aplicado a la dinámica de cargas en dispositivos MESFET.

7.1. Introducción.

Tal y como expusimos en el capítulo 2, los métodos espectrales de Fourier son especialmente útiles en la solución de problemas cuyos dominios poseen condiciones de contorno de tipo periódicas o también en problemas de evolución en los que el fenómeno de interés no está relacionado con las fronteras. Este es el caso del modelo hidrodinámico de las corrientes ópticamente inyectadas, que resolvimos en los capítulos anteriores. Sin embargo, este tipo de métodos espectrales también requiere que tanto las condiciones iniciales como las aproximaciones a la solución del problema sean funciones suaves y continuas a trozos, lo cual hace poco práctica su utilización en la solución de problemas cuyas condiciones iniciales y de contorno son discontinuas, como por ejemplo los problemas de transporte de carga en dispositivos MESFET.

En este capítulo nos proponemos explorar otros métodos espectrales alternativos, tales como los métodos RBF, para hallar la solución numérica de este tipo de problemas.

El modelo hidrodinámico más sencillo que se utiliza actualmente para la simulación de los procesos de transporte de carga en los dispositivos MESFET es el Modelo de Drift-Difusión, el cual se puede derivar de la ecuación de Boltzman [43]. Para resolver numéricamente este modelo, los métodos más comunes son los esquemas de diferencias finitas [77, 79], aunque también se

han hecho simulaciones mediante métodos de elementos finitos. [6]. Sin embargo, la complejidad de los patrones de la dinámica y la necesidad de aplicar condiciones de contorno discontinuas, hace que la solución numérica de estos problemas requiera un alto coste computacional. Recientemente, se han hecho simulaciones numéricas de dispositivos MESFET utilizando métodos RBF Globales [57, 63, 64]. Estos tienen la ventaja de que no necesitan una malla estructurada y por lo tanto no tienen las limitaciones de los métodos de diferencias finitas. Sin embargo, tal y como mencionamos en el capítulo 2, el gran obstáculo de los métodos RBF globales es el mal condicionamiento que pueden sufrir las matrices de interpolación producto de mallas muy densas, lo cual obliga a imponer parámetros de forma muy grandes, con la consiguiente pérdida de precisión. Para eludir este problema, también proponemos utilizar métodos de RBF locales para la solución del Modelo de Drift-Diffusion, puesto que los mismos usan información sólo de un pequeño número de nodos vecinos y no es necesario imponer parámetros de forma demasiado grandes. En particular hemos usado las RBF locales para calcular los pesos que aproximan los operadores que aparecen en las ecuaciones diferenciales que describen el modelo de Drift-Diffusion, como una combinación lineal de los valores de la función en un conjunto de nodos vecinos. Esto es análogo a lo que se hace con el método de diferencias finitas convencionales, solo que los pesos se calculan mediante interpolación con RBF en lugar de calcularlos mediante interpolación polinómica. Por ello, este método se conoce comunmente como RBF-FD. Para optimizar el tiempo de cómputo usaremos las fórmulas de los pesos con RBF calculadas en [9, 10, 11], que expusimos en el capítulo 2.

A manera de comparación, resolveremos también el modelo usando RBF globales, y verificamos así, que se pueden obtener los mismos resultados usando las RBF-FD locales.

7.1.1. Organización del capítulo.

Este capítulo está organizado de la siguiente manera:

En la sección 7.2 presentamos las ecuaciones del Modelo de Drift-Diffusion y su adimensionalización. En la sección 7.3 exponemos los métodos numéricos que usamos para resolver el modelo. Se describen la ecuación modificada implícita para el potencial y los esquemas numéricos, tanto para las RBF globales como las locales. La sección 7.4 contiene las soluciones numéricas del modelo de Drift-Diffusion usando RBF globales y también RBF locales, haciendo una comparación de ambos métodos. Finalmente en la sección 7.5

presentamos las conclusiones del capítulo.

7.2. Formulación del modelo.

El modelo de Drift-Diffusion asume que la velocidad de los portadores sólo depende del campo eléctrico. Bajo esta suposición las ecuaciones del modelo para la simulación de un dispositivo MESFET son [57, 63, 64] la ecuación de densidad de corriente de electrones, la ecuación de continuidad y la ecuación de Poisson, dadas respectivamente por

$$\vec{J}_n = qn\mu\vec{E} + qD_n\nabla n \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\nabla \cdot \vec{J}_n \quad (7.2)$$

$$\nabla^2\varphi = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(N_d^+ - n) \quad (7.3)$$

donde $\varphi = \varphi(x, y, t)$ es el potencial, $\vec{E}(x, y, t) = -\nabla\varphi$ es el campo eléctrico, $n(x, y, t)$ la densidad de los electrones, $\vec{J}_n(x, y, t)$ la densidad de corriente, $\mu_n(\vec{E}, N_d)$ es el coeficiente de movilidad, N_d^+ la densidad de dopaje y $D_n(\vec{E}, N_d) = \mu_n K_B T / q$, el coeficiente de difusión. Para calcular el coeficiente de movilidad usamos la siguiente fórmula

$$\mu_n(\vec{E}, N_d) = \frac{\mu_0 + (v_s/E)(E/E_s)^4}{1 + (E/E_s)^4} \quad (7.4)$$

La referencia [95] describe cómo calcular la movilidad a campo bajo (μ_0), la velocidad de saturación v_s y el campo eléctrico crítico (E_s), que aparecen en la ecuación (7.4). Estos parámetros son funciones de la densidad de dopaje [57].

7.2.1. Ecuaciones adimensionales.

Usando las variables adimensionales de la tabla 7.2, y reemplazando los valores de las variables características de la tabla 7.1, se obtiene

$[\vec{J}_n]$	$[n]$	$[\mu_n]$	$[\vec{E}]$	$[D_n]$	$[\vec{x}]$	$[\varphi]$	$[t]$
$qN_d v_s$	N_d	μ_0	E_s	$\frac{\mu_0 K_B T}{q}$	x_0	V_0	$\frac{[x]}{v_s}$

Tabla 7.1: Valores característicos usados en la adimensionalización del modelo de Drift-Diffusion.

$\tilde{J}_n = \frac{J_n}{[\vec{J}_n]}$	$\tilde{\mu}_n = \frac{\mu_n}{[\mu_n]}$	$\tilde{n} = \frac{n}{[n]}$
$\tilde{E} = \frac{E}{[\vec{E}]}$	$\tilde{D}_n = \frac{D_n}{[D_n]}$	$\tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{[\varphi]}$
$\tilde{t} = \frac{t}{[t]}$	$\tilde{x} = \frac{x}{[\vec{x}]}$	$\tilde{y} = \frac{y}{[\vec{y}]}$

Tabla 7.2: Variables adimensionales del modelo de Drift-Diffusion.

$$\begin{aligned}\tilde{J}_n &= \left(\frac{\mu_0 E_s}{v_s} \right) \tilde{n} \tilde{\mu}_n \tilde{E} + \left(\frac{\mu_0 K_B T}{q v_s x_0} \right) \tilde{D}_n \nabla \tilde{n} \\ \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \tilde{t}} &= \nabla \cdot \tilde{J}_n \\ \nabla^2 \tilde{\varphi} &= - \left(\frac{q N_d x_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_0} \right) (1 - \tilde{n})\end{aligned}$$

Finalmente por simplicidad quitamos las tildes a las variables adimensionales.

$$\vec{J}_n = \alpha n \mu_n \vec{E} + \beta D_n \nabla n \quad (7.5)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{J}_n \quad (7.6)$$

$$\nabla^2 \varphi = -\gamma (1 - n) \quad (7.7)$$

donde $\vec{E}(x, y, t) = -\nabla \varphi$,

$$\alpha = \left(\frac{\mu_0 E_s}{v_s} \right), \quad \beta = \frac{\mu_0 K_B T}{q v_s x_0}, \quad \gamma = \left(\frac{q N_d x_0^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r V_0} \right) \quad (7.8)$$

son parámetros adimensionales y x_0 es la longitud característica de las dimensiones del dispositivo que toma valores en el orden de μm (10^{-6}m). De

la ecuación (7.4) el coeficiente de movilidad adimensional viene dado por

$$\mu_n = \frac{1 + E^3/\alpha}{1 + E^4} \quad (7.9)$$

donde $E = |\vec{E}|$. Por simplicidad tomamos el coeficiente de difusión igual a la movilidad, esto es ($D_n = \mu_n$).

7.3. Esquemas numéricos.

Las ecuaciones (7.5)-(7.7) definen un sistema de ecuaciones en derivadas parciales (EDPs) acopladas y altamente no lineales. Además, las condiciones de contorno que se imponen en la simulación de los dispositivos MESFET son discontinuas, lo cual hace todavía más difícil su solución numérica. Los métodos numéricos usados convencionalmente en la simulación de este tipo de dispositivos son esquemas de diferencias finitas. El procedimiento seguido en este tipo de esquemas es el siguiente:

- Se comienza con una distribución de la densidad del portador n conocida.
- Posteriormente, se resuelve la ecuación (7.7), para calcular la distribución del potencial.
- A partir de este potencial, se calcula la distribución del campo eléctrico \vec{E} y este resultado es usado en la ecuación (7.5), para calcular la densidad de corriente \vec{J}_n .
- Finalmente, esta densidad de corriente es usada en la ecuación (7.6) para actualizar la distribución de la densidad del portador en un nuevo paso de tiempo.

Este procedimiento se repite iterativamente hasta que se alcance un estado estacionario. El procedimiento explícito que acabamos de describir tiene varios inconvenientes que lo hacen bastante ineficiente: los gradientes altos en n y \vec{E} provocan valores muy altos de $\nabla \cdot \vec{J}_n$. Por lo tanto, para valores altos de ∇n , las restricciones de estabilidad obligan a utilizar pasos de tiempo muy pequeños. Para evitar estos inconvenientes, Movvaheddi *et al.* [58, 59], proponen un método implícito que permite el uso de pasos de tiempo mucho más grandes que con el enfoque explícito.

Cuando se usa un enfoque implícito para resolver la ecuación (7.7), en un instante de tiempo determinado $t + 1$, es necesario considerar el potencial φ^{t+1} en el lado izquierdo de la ecuación y la densidad del portador n^{t+1} en el lado derecho. Como n^{t+1} no se conoce, utilizamos desarrollos de Taylor para aproximar su valor como

$$n^{t+1} = n^t + \Delta t \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_t + O(\Delta t^2)$$

Usando ahora (7.6) y (7.5), el resultado es

$$n^{t+1} = n^t + \Delta t \nabla \cdot (-\alpha n^t \mu_n \nabla \varphi^{t+1} + \beta D_n \nabla n^t) \quad (7.10)$$

Introduciendo esta aproximación en (7.7), se obtiene la siguiente ecuación de Poisson modificada

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi^{t+1} (1 + \gamma \Delta t \alpha n^t \mu_n) + \gamma \Delta t \alpha \mu_n (\nabla \varphi^{t+1} \cdot \nabla n^t) = \\ = -\gamma (1 - n^t) + \gamma \beta D_n \Delta t \nabla^2 n^t \end{aligned} \quad (7.11)$$

7.3.1. RBF globales aplicadas al modelo de Drift-Diffusion.

De acuerdo a la sección 2.3.2 del capítulo 2, escribimos el potencial y la densidad de electrones en el espacio generado por un conjunto de N funciones de base radial

$$\varphi^{t+1}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \phi(r_j(\mathbf{x}), \varepsilon) \lambda_j^{t+1} \quad (7.12)$$

$$n^t(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \phi(r_j(\mathbf{x}), \varepsilon) \eta_j^t \quad (7.13)$$

donde $r_j(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|$, es la distancia de \mathbf{x} al conjunto de N centros, $\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^N$ y $\phi(r_j(\mathbf{x}), \varepsilon)$ es una función radial centrada en \mathbf{x}_j . Las RBF que usamos en este caso son las multicuádricas de Hardy [45]

$$\phi(r_j, \varepsilon) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r_j^2}. \quad (7.14)$$

Los coeficientes λ_j^{t+1} se calculan mediante colocación de (7.12) en la ecuación en derivadas parciales (7.11), sobre los nodos interiores y la colocación de las condiciones de contorno en los nodos frontera. Por conveniencia usamos el mismo conjunto de centros RBF como nodos de colocación. Por tanto, obtenemos un sistema lineal de la forma.

$$A \boldsymbol{\lambda}^{t+1} = \mathbf{f} \quad (7.15)$$

Por otro lado, los coeficientes η_j^t se calculan, por interpolación RBF, resolviendo el sistema

$$B \boldsymbol{\eta} = \mathbf{g} \quad (7.16)$$

donde los elementos de la matriz B tiene la forma $B_{ij} = \phi(r_j(\mathbf{x}_i))$, $i, j = 1, \dots, N$ y $g_i = n^t(\mathbf{x}_i)$

El vector $\boldsymbol{\lambda}^{t+1}$ contiene las coordenadas de las incógnitas λ_j^{t+1} de la expansión con RBF de la solución en cada centro. De (7.11) y (7.12), los coeficientes de la matriz A para una fila correspondiente a un nodo interior \mathbf{x}_i , son,

$$A_{i,j} = \nabla^2 \phi_j(r_j(\mathbf{x}_i), \varepsilon) (1 + \gamma \Delta t \alpha n^t(\mathbf{x}_i) \mu_n(\mathbf{x}_i)) + \gamma \Delta t \alpha \mu_n(\mathbf{x}_i) (\nabla \phi_j(r_j(\mathbf{x}_i), \varepsilon) \cdot \nabla n^t(\mathbf{x}_i)) \quad (7.17)$$

Por otro lado, los correspondientes elementos del vector \mathbf{f} son,

$$f_i = -\gamma (1 - n^t(\mathbf{x}_i)) + \gamma \beta \Delta t D_n(\mathbf{x}_i) \nabla^2 n^t(\mathbf{x}_i) \quad (7.18)$$

Los correspondientes resultados para los nodos frontera con condiciones de contorno Dirichlet son

$$A_{i,j} = \phi(r_j(\mathbf{x}_i), \varepsilon), \quad f_i = \varphi(\mathbf{x}_i) \quad (7.19)$$

y para las condiciones de contorno Neumann

$$A_{i,j} = \nabla \phi(r_j(\mathbf{x}_i), \varepsilon) \cdot \hat{n}_\perp, \quad f_i = 0 \quad (7.20)$$

donde \hat{n}_\perp es el vector unitario normal a la superficie.

El proceso de solución completo es el siguiente

1. Usar (7.9) para calcular los coeficientes de movilidad $\mu_n(\mathbf{x}_i)$ y de difusión $D_n(\mathbf{x}_i)$ que aparecen en las ecuaciones (7.17) y (7.18).

2. Calcular el gradiente de n , $\nabla n^t(\mathbf{x}_i)$ que aparece en (7.17) usando los valores de sus coeficientes obtenidos de la solución del sistema (7.16). Esto es

$$\nabla n^t(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \nabla \phi(r_j(\mathbf{x}_i), \varepsilon) \eta_j^t \quad (7.21)$$

3. Calcular la matriz A y el vector \mathbf{f} y luego resolver el sistema lineal (7.15) para calcular el vector $\boldsymbol{\lambda}^{t+1}$.
4. Usar (7.12) para calcular el potencial $\varphi^{t+1}(\mathbf{x}_i)$ en cada nodo de colocación.
5. Usar (7.7) para calcular la distribución de la densidad del portador en los nodos interiores,

$$n^{t+1}(\mathbf{x}_i) = 1 + \nabla^2 \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_i) / \gamma, \quad (7.22)$$

6. Volver al paso 1, para avanzar la solución a un nuevo paso de tiempo.

7.3.2. RBF locales aplicadas al modelo de Drift-Diffusion.

Para resolver la ecuación de Poisson modificada usando el método RBF-FD local que expusimos en la sección 2.3.2, se sigue un procedimiento análogo al descrito para el método global (sección 7.3.1). La diferencia es que ahora, en lugar de usar todos los nodos de la discretización como centros, usamos un subconjunto de nodos vecinos y en lugar de calcular las coordenadas de los coeficientes mediante su expansión en funciones RBF, se calculan los pesos correspondientes a la expansión lineal de los operadores de las ecuaciones del modelo. En este caso usaremos las fórmulas de los pesos dadas por la referencia [9], que expusimos en el capítulo 2, sobre una molécula computacional con 5 nodos estructurados equiespaciadamente para el Laplaciano y 3 nodos en el caso de las primeras derivadas parciales y las condiciones de contorno.

De esta manera, para poder emplear las RBF locales, la ecuación de Poisson implícita (7.11) también se puede escribir como

$$\begin{aligned} & \nabla^2 \varphi^{t+1} (1 + \gamma \Delta t \alpha n^t \mu_n) + \\ & + \gamma \Delta t \alpha \mu_n (\partial_x \varphi^{t+1} \partial_x n^t + \partial_y \varphi^{t+1} \partial_y n^t) = \\ & - \gamma (1 - n^t) + \gamma \beta D_n \Delta t \nabla^2 n^t \end{aligned} \quad (7.23)$$

Nótese que para resolver la ecuación (7.23), es necesario calcular el Laplaciano ∇^2 y las derivadas parciales ∂_x y ∂_y , tanto del potencial φ^{t+1} , como de la densidad de electrones n^t . Por lo tanto, es necesario calcular los pesos de estos tres operadores. De acuerdo con (2.38), dado un punto interior \mathbf{x}_I , los pesos para cada operador, usando un conjunto de M nodos vecinos, se encuentran resolviendo los sistemas

$$\nabla^2 [\phi(r_i(\mathbf{x}_I))] = \sum_{k=1}^M \mathcal{L}_k \phi(r_i(\mathbf{x}_k)) \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (7.24)$$

$$\partial_x [\phi(r_i(\mathbf{x}_I))] = \sum_{k=1}^M \mathcal{X}_k \phi(r_i(\mathbf{x}_k)) \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (7.25)$$

$$\partial_y [\phi(r_i(\mathbf{x}_I))] = \sum_{k=1}^M \mathcal{Y}_k \phi(r_i(\mathbf{x}_k)) \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (7.26)$$

donde $r_i(\mathbf{x}_k) = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k\|$ y \mathcal{L}_k , \mathcal{X}_k y \mathcal{Y}_k , con $k = 1, \dots, M$, son los pesos del Laplaciano y las derivadas parciales con respecto a x e y , respectivamente.

Si usamos una molécula computacional con $M = 5$ nodos para los puntos interiores, siguiendo el orden convencional usado en [8, 91], el vector de pesos para el Laplaciano se calcula usando las fórmulas (2.53) y (2.54). Por otro lado, para las derivadas parciales de primer orden y para las condiciones de contorno de tipo Neumann, usamos moléculas computacionales con $M = 3$ nodos. Los valores correspondientes a estos pesos se calculan usando las fórmulas (2.50) para el Laplaciano y (2.55)-(2.57) para la primera derivada y las condiciones de contorno de tipo Neumann, respectivamente.

Por tanto, para calcular φ^{t+1} usando la fórmula (7.23) es necesario resolver el sistema

$$\begin{bmatrix} A_{N_I \times N} \\ A_{N_B \times N} \end{bmatrix} \varphi^{t+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{N_I} \\ \mathbf{f}_{N_B} \end{bmatrix} \quad (7.27)$$

donde $A_{N_I \times N}$ y $A_{N_B \times N}$ son matrices dispersas que contienen los coeficientes de φ^{t+1} en los puntos interiores y la frontera respectivamente, mientras que \mathbf{f}_{N_I} y \mathbf{f}_{N_B} son los correspondientes valores del vector \mathbf{f} en los puntos interiores y en la frontera.

Si \mathbf{x}_i es un punto interior e $I_i = \{I_i(1), \dots, I_i(5)\}$ es el conjunto de índices de los vecinos de este punto, entonces de acuerdo con (7.23) se tiene que

$$A_{i, I_i(k)} = (1 + \gamma \Delta t \alpha \mu_n n^t(\mathbf{x}_i)) \mathcal{L}_k + \gamma \Delta t \alpha \mu_n (n_x^t(\mathbf{x}_i) \mathcal{X}_k + n_y^t(\mathbf{x}_i) \mathcal{Y}_k) \\ x_i \in \Omega \quad y \quad k = 1, \dots, 5. \quad (7.28)$$

donde

$$n_x^t(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{X}_k n(\mathbf{x}_k), \quad (7.29)$$

$$n_y^t(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{Y}_k n(\mathbf{x}_k). \quad (7.30)$$

y para calcular \mathbf{f}_{N_I}

$$f(\mathbf{x}_i) = -\gamma(1 - n^t(\mathbf{x}_i)) + \gamma\beta\Delta t D_n \sum_{k=1}^M \mathcal{L}_k n(\mathbf{x}_k) \quad (7.31)$$

Para \mathbf{x}_i en la frontera, si la condición de contorno es de tipo Dirichlet, los elementos de la fila $A_{i,j}$ de la matriz serán

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } j = i \\ 0 & \text{si } j \neq i \end{cases} \quad (7.32)$$

y los correspondientes valores del vector \mathbf{f} ,

$$f_i = \varphi(\mathbf{x}_i),$$

mientras que, si las condiciones de contorno son de tipo Neumann, se tiene

$$A_{i,B_i(k)} = \mathcal{B}_k,$$

donde $B_i = \{B_i(1), B_i(2), B_i(3)\}$, es el conjunto de índices de los vecinos del punto $\mathbf{x}_i \in \partial\Omega$ y \mathcal{B}_k son los pesos correspondientes de las condiciones de contorno de tipo Neumann que se pueden calcular usando las fórmulas (2.55)-(2.57),

Una vez que calculamos φ^{t+1} en los nodos interiores, resolviendo el sistema (7.27), el valor de n^{t+1} lo calculamos usando ya sea (7.10) ó (7.22). A continuación mostramos la fórmula correspondiente a la segunda opción

$$\begin{aligned} n^{t+1}(\mathbf{x}_i) = & n(\mathbf{x}_i) - \Delta t \alpha \mu_n (\partial_x \varphi^{t+1} n_x^t + \partial_y \varphi^{t+1} n_y^t + \\ & \dots + n^t \nabla^2 \varphi^{t+1})(\mathbf{x}_i) + \Delta t \beta D_n \nabla^2 n^t(\mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (7.33)$$

con $\mathbf{x}_i \in \Omega$, donde

$$\partial_x \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{X}_k \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_k) \quad (7.34)$$

$$\partial_y \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{Y}_k \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_k) \quad (7.35)$$

$$\nabla^2 \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{L}_k \varphi^{t+1}(\mathbf{x}_k) \quad (7.36)$$

$$\nabla^2 n^t(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^M \mathcal{L}_k n^t(\mathbf{x}_k) \quad (7.37)$$

Finalmente, para actualizar las condiciones de contorno de tipo Neumann, dado que ya conocemos los valores de n^{t+1} en los puntos interiores, usamos una molécula computacional con 3 nodos, compuesta por el nodo frontera y dos nodos interiores, y dado que

$$\sum_{k=1}^3 \mathcal{B}_k n^{t+1}(\mathbf{x}_{B_i(k)}) = 0 \quad (7.38)$$

si \mathbf{x}_i es el nodo sobre la frontera, entonces

$$n^{t+1}(\mathbf{x}_{B_i(1)}) = -\frac{\mathcal{B}_2 n^{t+1}(\mathbf{x}_{B_i(2)}) + \mathcal{B}_3 n^{t+1}(\mathbf{x}_{B_i(3)})}{\mathcal{B}_1} \quad (7.39)$$

7.4. Resultados numéricos

Para resolver el modelo de Drift-Diffusion usando métodos RBF, hemos considerado un dispositivo MESFET de GaAs cuya estructura 2D se muestra en la figura 7.1. Teniendo en cuenta las dimensiones de este dispositivo, hemos tomado $x_0 = 0.1 \mu\text{m}$ y, por lo tanto, el dominio de integración en variables adimensionales es un rectángulo de dimensiones $(L = 14) \times (H = 3)$.

Como una primera aproximación a la solución de las ecuaciones (7.5)-(7.7), hemos tomado como dopaje $N_d^+ = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Esto nos permite calcular los valores de la movilidad a campo bajo μ_0 , la velocidad de saturación v_s y el campo eléctrico crítico E_s , cuyos valores son, respectivamente

$$\mu_0 = 0.994 \text{ mV}^{-1} \text{ s}^{-1}; \quad v_s = 1.0297 \times 10^5 \text{ ms}^{-1} \quad \text{y} \quad E_s = 3.1388 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$$

En el apéndice C se presenta el procedimiento completo de cálculo para estas tres variables de acuerdo con [95]. Por lo tanto, los valores de los parámetros adimensionales definidos en (7.8) son

$$\alpha = 3.03; \quad \beta = 2.4959 \quad \text{y} \quad \gamma = 0.0138$$

Finalmente, por simplicidad hemos tomado las constantes de movilidad y de difusión: $\mu_n = D_n = 1$

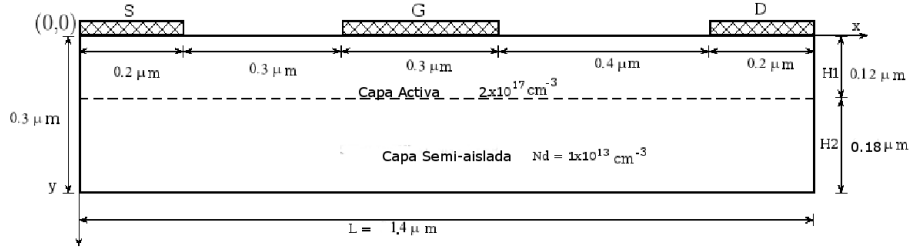


Figura 7.1: Geometría del dispositivo MESFET simulado.

Las condiciones iniciales para la distribución de la densidad del portador son

$$n_0 = \begin{cases} 1 & \text{si } (x, y) \in [0, L] \times [0, H_1] \\ 0 & \text{si } (x, y) \in [0, L] \times [H_1, H_2] \end{cases}$$

Como el dispositivo está cargado, las condiciones de contorno de tipo Dirichlet para la ecuación de Poisson son

$$\varphi(x, y = 0, t) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in S \\ 2 & \text{si } x \in D \\ -0.5 & \text{si } x \in G \end{cases}$$

En todas las demás fronteras usamos condiciones de contorno de Neumann

$$\nabla\varphi \cdot \hat{n}_\perp = 0$$

Por otro lado, las condiciones de contorno para la ecuación de distribución de la densidad n son

$$n^t(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in S, D \\ 0 & \text{si } x \in G \end{cases}$$

y en las demás fronteras

$$\nabla n^t \cdot \hat{n}_\perp = 0.$$

7.4.1. Resultados usando RBF globales.

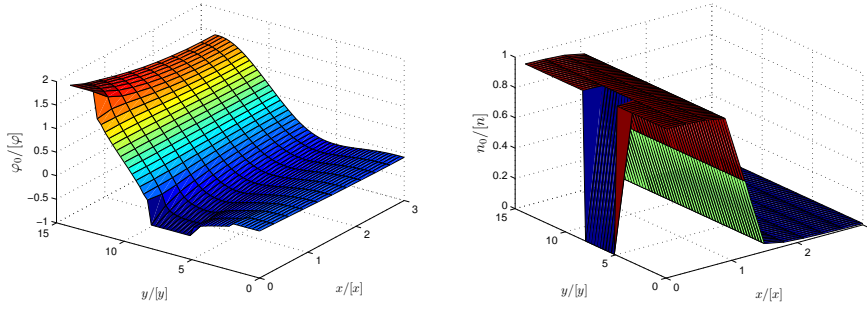


Figura 7.2: Condiciones iniciales de: (izquierda) distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la Densidad de los electrones n .

Para calcular las soluciones del modelo de Drift-Diffusion con RBF globales hemos hecho una discretización con $N = 550$ puntos, de los cuales 432 son interiores y 118 son de la frontera. Haciendo un estudio de convergencia del parámetro de forma para una ecuación de Poisson, hemos tomado un valor de $\varepsilon = 1.5$, lo cual es bastante grande. Sin embargo este valor alto es necesario ya que para parámetros más pequeños el número de condicionamiento se hace muy grande, lo cual introduce errores en la aproximación. El paso de tiempo que hemos usado es de $\Delta t = 0.01$.

En la figura 7.2 se puede observar las condiciones iniciales para la distribución del potencial $\varphi(\mathbf{x}, 0)$ (izquierda) y la distribución de la densidad de los electrones $n(\mathbf{x}, 0)$ (derecha). Por otro lado, en la figura 7.3 vemos la evolución de las soluciones para un tiempo relativamente corto $t = 0.1$ ps. Nótese cómo la distribución del potencial varía muy poco, mientras que la distribución de la densidad lo hace mucho más rápido. Para este caso en particular, las soluciones van a un estado estacionario en un tiempo relativamente corto. En la figura 7.4 se pueden apreciar las soluciones numéricas cuando se ha llegado a dicho estado estacionario. Con el método global observamos que los tiempos de computo son bastante cortos, a pesar de haber utilizado pasos de tiempo bastante pequeños.

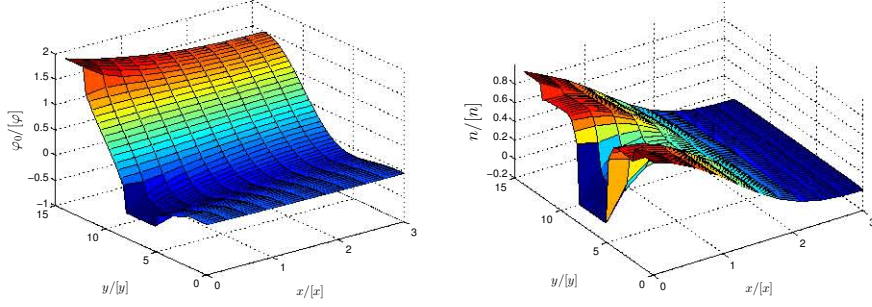


Figura 7.3: (izquierda) Distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la densidad de los electrones n en $t = 0.1$ ps, usando RBFs globales

7.4.2. Resultados usando RBF locales.

Para resolver el modelo de Drift-Diffusion usando RBF-FD locales hemos usado una discretización espacial con $N = 1100$ puntos, de los cuales 954 son interiores y 146 son de frontera y hemos elegido un parámetro de forma $\varepsilon = 0.56$ sin que la matriz de colocación de la solución se vuelva mal condicionada. Esto demuestra que usando el método local es posible aumentar el número de nodos a la vez que no es necesario poner un parámetro de condicionamiento demasiado grande.

En la figura 7.5 se aprecian la distribución del potencial φ (arriba) y la distribución de la densidad de los electrones n (abajo), usando RBF-FD locales, cuando se ha llegado a un estado estacionario. Nótese que los resultados son muy similares a los obtenidos usando RBF globales. Incluso, podemos afirmar que las aproximaciones de las soluciones son mucho más suaves que las logradas con el método global.

7.5. Conclusiones.

En este capítulo hemos reformulado la ecuación para el potencial del modelo de Drift-Diffusion para un dispositivo MESFET, mediante un método implícito, de manera que podemos eludir los problemas de estabilidad que provocan los gradientes de la densidad cuando se utilizan métodos explícitos. Además, hemos propuesto un algoritmo eficiente para resolver la ecuación implícita (7.11).

Hemos resuelto el modelo resultante usando RBF globales y también he-

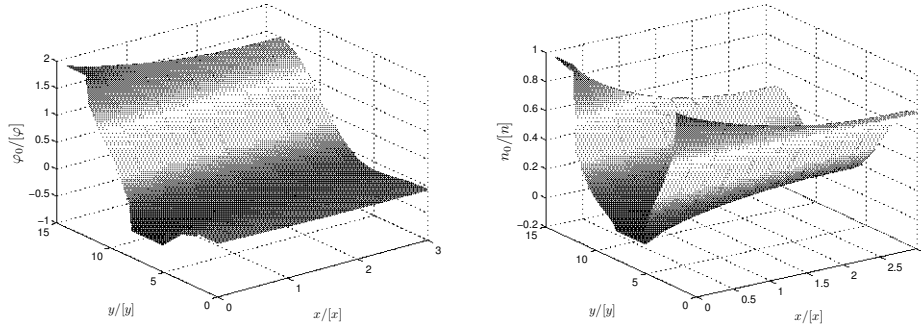


Figura 7.4: (izquierda) Distribución del potencial φ y (derecha) distribución de la densidad de los electrones n , usando RBFs globales, cuando han alcanzado su estados estacionario.

mos desarrollado un esquema numérico para usar las RBF locales para calcular los pesos de las aproximaciones de los operadores que contienen las ecuaciones del modelo de Drift-Diffusion.

Los resultados obtenidos usando RBF locales son muy acordes con los que se obtienen con el método global. Así que podemos usar este último método como un esquema alternativo al método global.

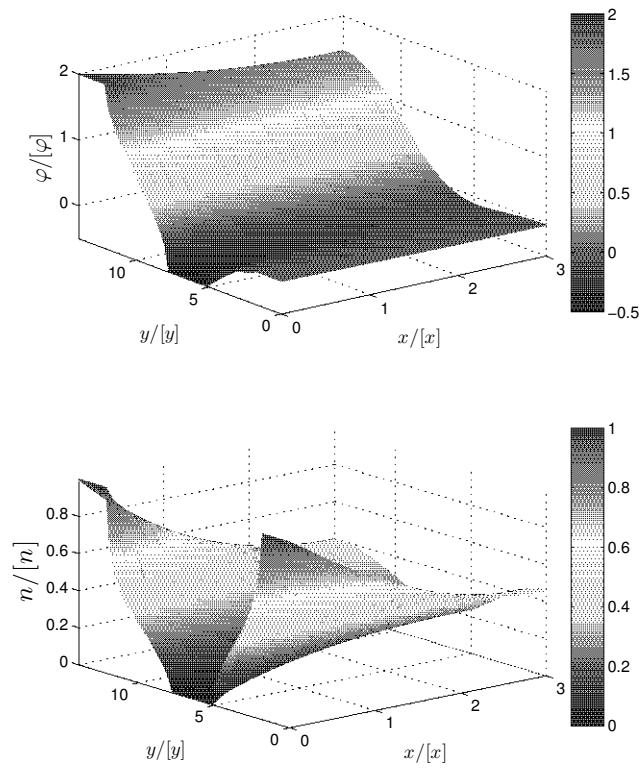


Figura 7.5: (arriba) Distribución del potencial φ y (abajo) distribución de la densidad de los electrones n , usando RBF-FD locales.

Capítulo 8

Conclusiones generales.

En esta tesis hemos desarrollado esquemas numéricos, basados en métodos espectrales, para el estudio de un modelo hidrodinámico que describe las dinámicas de corrientes, inyectadas ópticamente, que se producen en un dispositivo semiconductor de Múltiples Pozos Cuánticos (MQW). El uso de métodos espectrales para la resolución del problema espacial del modelo proporciona una alta precisión en las soluciones y un coste computacional bajo. Los resultados obtenidos con nuestro esquema numérico guardan una alta concordancia, no solo cualitativa sino también cuantitativa, con aquellos obtenidos por Sherman *et al.* en la referencia [1].

La estabilidad del esquema numérico nos ha permitido estudiar un modelo extendido 2D, que incluye la influencia de un campo magnético en la dinámica de las cargas. Los resultados numéricos obtenidos de la simulación del caso más simple de este modelo, donde sólo se incluye el efecto del campo magnético, nos ha permitido verificar que la frecuencia y el radio del ciclotrón de dichos resultados concuerdan con los valores teóricos obtenidos de las constantes físicas del problema. Los resultados obtenidos en esta tesis pueden servir de base para futuros experimentos que contemplen la influencia de campos magnéticos en la inyección de carga, complementando a su vez, trabajos recientes realizados por Rao y Sipe en 2011 [66].

Por otro lado, también hemos aplicado métodos espectrales para resolver numéricamente una formulación unidimensional del modelo hidrodinámico bidimensional, basada en una aproximación mediante ondas planas que da lugar a un modelo más simple pero que aún conserva la física principal del problema original. El esquema numérico que hemos construido para este modelo unidimensional es capaz de calcular soluciones para tiempos largos. Los resultados numéricos muestran, no solo una concordancia cualitativa, sino

también cuantitativa con la solución del modelo bidimensional completo y con los resultados de la referencia [1]. Además, para tiempos largos, hemos derivado una solución asintótica que concuerda con los resultados numéricos.

Para realizar un estudio sobre la formación de ondas de choque y el papel que juega el término de convolución en el modelo unidimensional, hemos diseñado un esquema numérico basado en el método de partículas, el cual nos permite imponer condiciones iniciales en las ecuaciones que conducen a la formación de “wave breaking”, que no es posible ver usando métodos espectrales. Mediante el análisis de las soluciones obtenidas con este método, hemos comprobado, por una parte, que en ausencia del término de convolución se generan choques que hacen que la densidad tienda a infinito en tiempos finitos, aunque se tomen condiciones iniciales suaves y por otra parte que, con la inclusión de este término, se logra detener la formación de choques.

Por otro lado, también hemos resuelto el modelo de Drift-Diffusion para un dispositivo MESFET usando métodos de RBF globales y RBF-FD locales. Como consecuencia del análisis de los resultados obtenidos, proponemos éste último método como un esquema alternativo al método global, ya que permite eludir los problemas de mal condicionamiento que surgen en las matrices de interpolación del mismo y, además, los resultados del método basado en RBF-FD locales son muy acordes con los que se pueden obtener con el método global.

En esta tesis hemos resuelto numéricamente un modelo hidrodinámico que describe los procesos de transporte de carga en un dispositivo de MQW, en el que se ha considerado que los huecos son infinitamente pesados, lo cual significa que la densidad de los mismos no cambia con el tiempo. Dicho modelo se puede extender para tomar en cuenta el movimiento de los huecos, por lo que se tiene que incluir las correspondientes ecuaciones de continuidad y velocidad media local para los huecos. En futuras investigaciones aplicaremos métodos espectrales para resolver numéricamente este modelo extendido, incluyendo también la influencia de un campo magnético, con objeto de explorar las dinámicas que puedan aparecer en este modelo.

Por otro lado, el método RBF-FD, con el que resolvemos numéricamente el modelo de Drift-Diffusion, aproxima los operadores diferenciales sobre nodos estructurados usando fórmulas analíticas para calcular los pesos. Dado que no existen fórmulas analíticas para moléculas computacionales formadas por un gran número de nodos, como trabajo futuro planeamos calcular dichos pesos numéricamente. Esto nos permitirá aumentar el tamaño de la molécula computacional, mejorando así la precisión del método.

Para finalizar planeamos aplicar las técnicas numéricas desarrolladas en esta tesis a otros problemas que contengan ecuaciones de tipo hidrodinámico y/o de Drift-Diffusion.

Apéndice A

Derivación del campo eléctrico 1D con una aproximación de ondas planas.

Dada la integral:

$$\mathbf{E} = \frac{e}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} N(x-X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X\mathbf{i} + Y\mathbf{j}}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX dY \quad (\text{A.1})$$

observemos que la integral $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{Y}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dY = 0$, ya que el integrando es impar. Así que $\mathbf{E}(x, y) = E(x, y)\mathbf{i}$ donde:

$$E = \frac{e}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} N(x-X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX dY \quad (\text{A.2})$$

Ahora resolvemos esta integral fuera de un cuadrado de lado 2δ . Para ello dividimos el dominio en dos partes y calculamos la integral en cada parte.

1. $\Omega_1 : |Y| > \delta$ y $|X| < \delta$

Sea:

$$E_{|\Omega_1|} = E_1 = \frac{e}{\epsilon} \int_{-\delta}^{\delta} X N(x-X) \int_{|Y|>\delta} \frac{dY}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX$$

Tomando $N(x - X) \approx N(x) - N'(x)X$, entonces,

$$\begin{aligned}
 E_1 &\approx \frac{e}{\epsilon} \int_{-\delta}^{\delta} (N(x) - N'(x)X) X \int_{|Y|>\delta} \frac{dY}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX \\
 &= \frac{e}{\epsilon} \left[N(x) \int_{|Y|>\delta} \int_{-\delta}^{\delta} \frac{X dX}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dY \right. \\
 &\quad \left. - N'(x) \int_{-\delta}^{\delta} X^2 \int_{|Y|>\delta} \frac{dY}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX \right]
 \end{aligned}$$

La contribución de $N(x)$ es cero porque la integral $\int_{-\delta}^{\delta} \frac{X dX}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} = 0$ ya que el integrando es impar. Sustituyendo el cambio de variable $Y = |X|Z$ en la última integral da como resultado

$$\begin{aligned}
 E_1 &\approx -\frac{eN'(x)}{\epsilon} \int_{-\delta}^{\delta} X^2 dX \int_{|Y|>\delta} \frac{|X| dZ}{|X|^3 (1 + Z^2)^{3/2}} \\
 &= -\frac{eN'(x)}{\epsilon} \int_{-\delta}^{\delta} \frac{X^2}{|X|^2} dX \int_{|Y|>\delta} \frac{dZ}{(1 + Z^2)^{3/2}} \\
 &= -\frac{eN'(x)}{\epsilon} \int_{-\delta}^{\delta} dX \int_{|Y|>\delta} \frac{dZ}{(1 + Z^2)^{3/2}} \\
 &= -\frac{eN'(x)}{\epsilon} 2\delta \int_{|Y|>\delta} \frac{dZ}{(1 + Z^2)^{3/2}} \\
 &= 0 \quad \text{cuando } \delta \rightarrow 0
 \end{aligned}$$

2. $\Omega_2 : |X| > \delta$

$$E_{|\Omega_2} = E_2 = \frac{e}{\epsilon} \int_{|X|>\delta} X N(x - X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dY}{(X^2 + Y^2)^{3/2}} dX$$

Sustituyendo nuevamente el cambio de variable $Y = |X|Z$

$$\begin{aligned}
 E_2 &= \frac{e}{\epsilon} \int_{|X|>\delta} X N(x - X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|X| dZ}{|X|^3 (1 + Z^2)^{3/2}} dX \\
 &= \frac{e}{\epsilon} \int_{|X|>\delta} \frac{X}{|X|^2} N(x - X) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dZ}{(1 + Z^2)^{3/2}} dX \\
 &= \frac{2e}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N(x - X)}{X} dX
 \end{aligned}$$

Donde la integral $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dZ}{(1+Z^2)^{3/2}} = 2$. Por lo tanto, tenemos que calcular la integral $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{N(x-X)}{X} dX$ usando el valor principal de Cauchy (v.p.).

Definiendo,

$$\text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x-x'} N(x', t) dx' = (K * N)(x, t)$$

$K(x) = 1/x$, el campo eléctrico para soluciones de ondas planas está dado por,

$$\mathbf{E} = \frac{2e}{\epsilon} (K * N) \mathbf{i} \quad (\text{A.3})$$

con $N = N_e(x, t)$, $-N_h(x)$ para electrones y huecos respectivamente.

Apéndice B

Convolución exacta.

La transformada de Hilbert de una función de valor real $\rho(x)$, definida en la recta real, se define como

$$\frac{1}{\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x-x'} \rho(x') dx' = \frac{1}{\pi} \beta(\rho). \quad (\text{B.1})$$

Si queremos encontrar una función analítica $f(z)$, en el semiplano complejo $\text{Im}(z) > 0$, con $\rho(x) = \lim_{z \rightarrow x} \text{Re}(f(z))$, entonces $\frac{1}{\pi} \beta(\rho) = \lim_{z \rightarrow x} \text{Im}(f(z))$. Consideremos la onda semicircular

$$\rho(x) = \begin{cases} \sqrt{1-x^2} & \text{si } x^2 < 1, \\ 0 & \text{si } x^2 \geq 1, \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Probaremos que

$$\frac{1}{\pi} \beta(\rho) = \begin{cases} x - \sqrt{x^2 - 1} & \text{si } x > 1, \\ x & \text{si } |x| < 1, \\ x + \sqrt{x^2 - 1} & \text{si } x < -1. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Sea z una variable compleja, definimos $\sqrt{1-z^2}$ colocando los cortes de la bifurcación empezando en $z = 1$ y $z = -1$ en el semiplano inferior y satisfaciendo $\sqrt{1-z^2} > 0$ para $-1 < z = x < 1$, entonces obtenemos:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \sqrt{1-z^2} = \sqrt{1-x^2} & \text{si } -1 < z = x < 1, \\ (2) \quad & \sqrt{1-z^2} = -i\sqrt{x^2-1} & \text{si } z = x > 1, \\ (3) \quad & \sqrt{1-z^2} = i\sqrt{x^2-1} & \text{si } z = x < -1, \\ (4) \quad & \sqrt{1-z^2} \sim -iz & \text{cuando } |z| \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Ahora, considerando el semiplano $\text{Im}(z) > 0$ y definiendo la función analítica

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2} - iz} = \sqrt{1-z^2} + iz,$$

tomando en cuenta (B.5) y haciendo algunas operaciones algebraicas sencillas tenemos que:

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow x} \text{Re}(f(z)) &= \rho(x), \text{ la onda semicircular (B.2)} \\ \lim_{z \rightarrow x} \text{Im}(f(z)) &= \frac{1}{\pi} \beta(\rho) \text{ la transformada de Hilbert (B.1),} \end{aligned}$$

entonces de la ecuación (B.3) se obtiene la convolución exacta de las funciones $\rho(x)$ y $1/\pi x$.

Mediante un simple cambio de coordenadas, es fácil ver que para una onda semi-elíptica

$$\rho(x) = \begin{cases} \sqrt{r^2 - (x-c)^2} & \text{si } (x-c)^2 < r^2, \\ 0 & \text{si } (x-c)^2 \geq r^2, \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

donde c y $r > 0$ son constantes. Entonces

$$\frac{1}{\pi} \beta(\rho) = \begin{cases} x - c - \sqrt{(x-c)^2 - r^2} & \text{si } x - c > r, \\ x - c & \text{si } |x - c| < r, \\ x - c + \sqrt{(x-c)^2 - r^2} & \text{si } x - c < -r. \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Apéndice C

Cálculo de algunos valores característicos para el modelo de Drift-Diffusion.

En el modelo de Drift-Diffusion (DD), los valores de la movilidad a campo bajo (μ_0), la velocidad de saturación (v_0) y el campo eléctrico crítico (E_s) son funciones de la densidad de dopaje [57]. Los valores de estas variables las utilizamos para calcular los parámetros adimensionales α, β y γ del sistema (7.5)-(7.7) en el capítulo 7 de esta tesis.

Zhou y Tan [95] establecen fórmulas específicas para calcular estos valores a partir de un determinado valor de N_d que varía en el rango de $(10^{15}, 10^{19}) \text{ cm}^{-3}$ y una determinada composición x para el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Dado que nuestro dispositivo MESFET está compuesto de GaAs , el valor de la composición podemos fijarlo en $x = 0$, por lo tanto μ_0, v_s y E_s sólo serán funciones de la densidad de dopado.

De esta manera, las fórmulas que aparecen en el artículo de Zhou y Tan [95] quedan

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \mu_1 + \frac{\mu_2}{1 + (N/N_\mu)^\alpha} \\ \text{con } \mu_1 &= 0.336 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{Vs}) \\ \mu_2 &= 0.6705 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{Vs}) \\ N_\mu &= 6.302 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \\ \alpha &= 0.957 \end{aligned} \tag{C.1}$$

$$\begin{aligned}
 & v_s = v_0 + v_1(N/N_v) + v_2(N/N_v)^{1.04} & (C.2) \\
 \text{con } & v_0 = 1.03 \times 10^7 \text{ cms}^{-1} \\
 & v_1 = -0.1836 \times 10^7 \text{ cms}^{-1} \\
 & v_2 = 0.1552 \times 10^7 \text{ cms}^{-1} \\
 & N_v = 1.714 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & E_s = E_0 + E_1(N(N_E)^\beta & (C.3) \\
 \text{con } & E_0 = 2.735 \text{ KV/cm} \\
 & E_1 = 0.752 \text{ KV/cm} \\
 & N_E = 2.14 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \\
 & \beta = 0.203
 \end{aligned}$$

Tomando una densidad de dopaje de $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ obtenemos los siguientes valores para μ_0 , E_s y v_s :

$$\mu_0 = 0.994 \text{ mV}^{-1} \text{ s}^{-1}; \quad v_s = 1.0297 \times 10^5 \text{ ms}^{-1} \quad \text{y} \quad E_s = 3.1388 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$$

Bibliografía

- [1] R.M. Abrarov, E. Ya. Sherman, and J. E. Sipe. Hydrodynamic model for relaxation of optically injected currents in quantum wells. *J. Appl. Phys. Lett.*, 91:232113, 2007.
- [2] R.M. Abrarov, E. Ya. Sherman, and J. E. Sipe. Dynamics of injected two-dimensional currents. *J. Appl. Phys.*, 104:103701, 2008.
- [3] J.M. Albella and J.M.M. Duart. *Fundamentos de Electrónica Física Y Microelectrónica*. Addison-Wesley Iberoamericana, 1996.
- [4] R. Atanasov, A. Haché, J.L.P. Hughes, H.M. Van Driel, and J.E. Sipe. Coherent control of photocurrent generation in bulk semiconductors. *Physical Review Letters*, 76(10):1703–1706, 1996.
- [5] Stefano Atzeni and Jürgen Meyer ter Vehn. *The Physics of Inertial Fusion : BeamPlasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*. Oxford Science Publications, 2004.
- [6] J.J. Barnes, R.J. Lomax, and G.I. Haddad. Finite-element simulation of GaAs mesfet’s with lateral doping profiles and submicron gates. *IEEE Transactions on Electron Devices*, ED-23(9):1042–1048, 1976.
- [7] Keith Barnham and Dimitri Vvedensky. *Low-Dimensional Fundamentals and Device Applications*. Cambridge University Press, 2001.
- [8] V. Bayona. Optimal finite difference-type formulas generated from radial basis functions. Master’s thesis, Universidad Carlos III de Madrid, May 2011.
- [9] V. Bayona, M. Moscoso, M. Carretero, and M. Kindelan. RBF-FD formulas and convergence properties. *J. Comput. Phys.*, 229(22):8281–8295, 2010.

- [10] V. Bayona, M. Moscoso, and M. Kindelan. Optimal constant shape parameter for multiquadric based RBF-FD method. *J. Comput. Phys.*, 230(19):7384–7399, 2011.
- [11] V. Bayona, M. Moscoso, and M. Kindelan. Optimal variable shape parameter for multiquadric based RBF-FD method. *Journal of Computational Physics*, 231(6):2466–2481, 2012.
- [12] J. P. Berrut and L. Trefethen. Barycentric Lagrange interpolation. *SIAM, SIAM Review*, 46(3):501–517, 2004.
- [13] Pallab Bhattacharya. *Properties of III-V Quantum Wells and Superlattices*. INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom, 1996.
- [14] L. L. Bonilla. Theory of nonlinear charge transport, wave propagation, and self-oscillations in semiconductor superlattices. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(14):R341–R381, 2002.
- [15] L. L. Bonilla, M. Álvaro, and M. Carretero. Spatially confined bloch oscillations in semiconductors superlattices. *Europhysics letters*, 95(47001), 2011.
- [16] L. L. Bonilla, M. Álvaro, and M. Carretero. Theory of spatially inhomogeneous bloch oscillations in semiconductors superlattices. *Physical Review B*, 84(155316), 2011.
- [17] L.L. Bonilla and H.T. Grahn. Non-linear dynamics of semiconductor superlattices. *Reports on Progress in Physics*, 68(3):577, 2005.
- [18] L.L. Bonilla and S. W. Teitsworth. *Nonlinear Wave Methods for Charge Transport*. Wiley, 2009.
- [19] Luis L. Bonilla, L. Barletti, and M. Alvaro. Nonlinear electron and spin transport in semiconductor superlattices. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 69(2):494–513, 2008.
- [20] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Dover, New York, 2000.
- [21] R.L. Boylestad and L.Nashelsky. *Electronic devices and circuit theory*. Prentice Hall, 1996.

-
- [22] E. Oran Brigham. *The Fast Fourier Transform and Its Applications*. Prentice-Hall, 1988.
 - [23] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarterony, and T. A. Zang. *Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains*. Springer-Verlag, 2006.
 - [24] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarterony, and T. A. Zang. *Spectral Methods: Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics*. Springer, 2007.
 - [25] D.P. Collantes and L.A.B. Vega. *Fundamentos de electrónica digital*. Ediciones Universidad de Salamanca, 2006.
 - [26] Peter Constantin. An Eulerian-Lagrangian approach for incompressible fluids: Local theory. *Journal of the AMS*, 14:263–278, 2000.
 - [27] J. W. Cooley and J. W. Tukey. An algorithm for machine calculation of complex fourier series. *AMS Mathematics of Computation*, 19(90), 1965.
 - [28] R. Courant and K. O. Friedrichs. *Supersonic Flow and Shock Waves*. Springer Verlag, New York, 1948.
 - [29] John H. Davies. *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors. An Introduction*. Cambridge University Press, 1998.
 - [30] Tobin A. Driscoll. A composite runge-kutta methods for the spectral solution of semilinear pdes. *Journal of Computational Physics*, 182:357–362, 2002.
 - [31] H. T. Duc, T. Meier, and S. W. Koch. Microscopic analysis of the coherent optical generation and the decay of charge and spin currents in semiconductors heteroestructures. *Physical Review Letters*, 95(086606), 2005.
 - [32] H.T. Duc, Q.T.Vu, T.Meier, H. Haug, and S.W. Koch. Temporal decay of coherently optical injected charge and spin currents due to carrier-lo-phonon and carrier-carrier scattering. *Physical Review B*, 74(165328), 2006.
 - [33] E. Dupont, P.b. Corkum, H.C.Liu, M. Buchanan, and Z.R. Wasilewski. Phase-controlled currents in semiconductors. *Physical Review Letters*, 74(18):3596–3599, 1995.

-
- [34] L.C. Evans. *Partial differential equations*. Graduate Studies in Mathematics Series. American Mathematical Society, 2010.
 - [35] Yossi Farjoun and Benjamin Seibold. Solving one dimensional scalar conservation laws by particle management, 2008.
 - [36] Yossi Farjoun and Benjamin Seibold. An exactly conservative particle method for one dimensional scalar conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 228(14):5298–5315, 2009.
 - [37] G. B. Folland. *Fourier analysis and its applications*. American Mathematical Society, 1992.
 - [38] B. Fornberg. *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. Cambridge University Press, USA, 1996.
 - [39] Richard Franke. Scattered data interpolation: Tests of some methods. *Mathematics of Computation*, 38(157):181–200, 1982.
 - [40] Carl L. Gardner. Semiconductor device simulation: the hydrodynamic model. *Potentials, IEEE*, 22, 2004.
 - [41] R.A. Gingold and J.J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars. *Mon.Not.Roy.Astron.Soc.*, 181:375, 1977.
 - [42] D. Gottlieb and S. A. Orszag. *Numerical analysis of spectral methods: theory and applications*. CBMS-NSF Regional Conference Series In Applied Mathematics SIAM Philadelphia, Pennsylvania, 1977.
 - [43] Tibor Grasser, Ting-Wei Tang, Hans Kosina, and Siegfried Selberherr. A review of hydrodynamic and energy-transport models for semiconductor device simulation. *Proceeding of the IEEE*, 91, 2003.
 - [44] A. Haché, Y. Kostoulas, R. Atanasov, J.L.P. Hughes, J.E.Sipe, and H.M. van Driel. Observation of coherently controlled photocurrent in unbiased, bulk gaas. *Physical Review Letters*, 78(2):306–309, 1997.
 - [45] R. L. Hardy. Multiquadratic equations of topography and other irregular surfaces. *Journal of Geophysical Research*, 76:1905–1915, 1971.
 - [46] Michael T. Heideman, Don H. Johnson, and C. Sideny Burrus. Gauss and the history of the fast fourier transform. *Archive for History of Exact Sciences (Springer)*, 34(3):265–277, 1985.

- [47] J. Hesthaven, S. Gottlieb, and D. Gottlieb. *Spectral Methods for Time-Dependent Problems*. Cambridge University Press, 2007.
- [48] Aly-Khan Kassam and Lloyd N. Trefethen. Fourth-order time-stepping for stiff PDEs. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26:1214–1233, 2005.
- [49] David A. Kopriva. *Implementing Spectral Methods for Partial Differential Equations: Algorithms for Scientists and Engineers*. Springer, 2009.
- [50] Egon Krause. *Fluid Mechanics: With Problems and Solutions, and an Aerodynamics Laboratory*. Springer Verlag, 2005.
- [51] R. J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Lectures in mathematics. Birkhäuser, 1992.
- [52] G. R. Liu and M. B. Liu. *Soothed Particle Hydrodynamics: a meshfree methods*. Word Scientific, 2003.
- [53] C. V. Loan. *Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform*. Frontiers in Applied Mathematics, Cornell University, SIAM, Ithaca New York, 1992.
- [54] Eric Justin Loren. All optical injection and detection of ballistic charge and spin currents in gallium arsinide, germanium, and silicon, 2011.
- [55] L.B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. 82:1013–1024, 1977.
- [56] David A.B. Miller. Optoelectronics applications of quantum wells. *Optics and Photonics News*, 1, 1990.
- [57] R. Mirzavand, A. Abdipour, G. Moradi, and M. Movahhedi. Full wave semiconductor devices simulation using meshless and finite-difference time-domain approaches. *IET Microwaves, Antennas and Propagation*, 5(6):685–691, 2001.
- [58] Masoud Movahhedi and Abdolali Abdipour. Accelerating the transient simulation of semiconductor devices using filter-bank transforms. *Int. J. Numer. Mod.*, 2006.
- [59] Masoud Movahhedi and Abdolali Abdipour. Efficient numerical methods for simulation of high-frequency active devices. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 54:2636–2645, 2006.

- [60] A. Najmaie, R.D.R. Bhat, and J.E. Sipe. All-optical injection and control of spin and electrical currents in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 68:165348, 2003.
- [61] Y. V. Pershin. Optically induced suppression of spin relaxation in two-dimensional electron systems with rashba interaction. *Phys. Rev. B*, 75, 2007.
- [62] W. H. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, and B. Frannely. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [63] R. Mirzavand R., A. Abdipour, G. Moradi, and M. Movahhedi. A meshless method for physical simulation of semiconductor devices. pages 1671–1674, 2009.
- [64] R. Mirzavand R., A. Abdipour, G. Moradi, and M. Movahhedi. Meshless physical simulation of semiconductor devices using a wavelet-based nodes generator. *IEICE Electronics Express*, 8(21):1757–1762, 2011.
- [65] Takeshi Ramiya. *Femtosecond Technology: From Basic Research to Future Applications*. Springer, Germany, 1999.
- [66] Kiran M. Rao and J.E. Sipe. Coherent photocurrent control in a magnetic field through quantum interference. *Phys. Rev. B*, 84:205313, 2011.
- [67] K.R. Rao, J.J. Hwang, and D.N. Kim. *Fast Fourier transform: Algorithms and applications*. Springer, 2010.
- [68] M. Saraniti and U. Ravaioli. *Nonequilibrium carrier dynamics in semiconductors*. Springer Proceedings in Physics, v. 110. Springer-Berlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [69] Scott A. Sarra. Integrated multiquadric radial basis function approximation methods. *Comput. Math. Appl.*, 51(8):1283–1296, 2006.
- [70] Scott A. Sarra and Edward J. Kansa. Multiquadric radial basis function approximation methods for the numerical solution of partial differential equations. *Advances in Computational Mechanics, volume 2, 2009*, 2(ISSN:1940-5820), 2009.
- [71] Eckehard Schöll. *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*. Cambridge University Press, 2001.

-
- [72] A. S. Sedra and K. C. Smith. *Microelectronic circuits*. Saunders College Pub., 1991.
- [73] Benjamin Seibold. M-matrices in meshless finite difference methods, 2006.
- [74] S. Selberherr. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer-Verlag, 1984.
- [75] J. Shen, T. Tang, and L.L. Wang. *Spectral Methods: Algorithms, Analysis and Applications*. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [76] Ya. Sherman, R.M. Abrarov, and E. J. E. Sipe. Mode coupling and evolution in broken-symmetry plasmas. *Physical Review B*, 80(161308), 2009.
- [77] Xiong Siqiang. Two-dimension numerical simulation of submicron-scale GaAs MESFET. *Journal of Electronics (China)*, 7, 1990.
- [78] J. Smith. *Mathematics of the Discrete Fourier Transform (DFT)*. Department of Music, Stanford University, Stanford, California, March 15, 2002.
- [79] C. M. Snowden. Numerical simulation of microwave GaAs MESFET. In *Proc. Int. Conf. Simulation Semiconductor Devices Process*, pages 406–425, 1984.
- [80] M.J. Stevens, A. Najmaie, R.D.R. Bhat, J.E. Sipe, H. M. van Driel, and Arthur L. smirl. Optical injection and coherent control of a ballistic charge current in GaAs/AlGaAs quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 94(8), 2003.
- [81] M.J. Stevens, Arthur L. smirl, R.D.R. Bhat, A. Najmaie, J.E. Sipe, and H. M. van Driel. Quantum interference control of ballistic pure spin currents in semiconductors. *Physical Review Letters*, 90(13), 2003.
- [82] S. M. Sze. *Semiconductor Devices: Physics and Technology*. John Wiley and Sons, 1985.
- [83] T. W. Tee and Lloyd N. Trefethen. A rational spectral collocation method with adaptatively transformed chebyshev grid points. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(5):1798–1811, 2006.

- [84] Lloyd N. Trefethen. *Spectral Methods in Matlab*. SIAM, USA, 2000.
- [85] D. Vasileska, D. Mamaluy, H. Khan, K. Raleva, and S.M. Goodnick. Semiconductor device modeling. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 5, 2008.
- [86] R.F.A. Wallis. *Semiconductor Physics and Applications*. Series on Semiconductor Science and Technology. OUP Oxford, 2000.
- [87] X. Wang, C. Xu, and S. Xu. The discrete singular convolution for analyses of elastic wave propagations in one-dimensional structures. *Applied Mathematical Modelling*, 34(11):493–3508, 2010.
- [88] G. W. Wei, Y. B. Zhao, and Y. Xiang. Discrete singular convolution and its application to the analysis of plates with internal supports. part 1: Theory and algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 55(8), 2002.
- [89] J.A.C. Weideman and S. C. Reddy. A matlab differentiation matrix suite. *ACM Transaction in Mathematical Software*, 26(4):465–512, 2000.
- [90] G. B. Whitham. *Linear and Nonlinear Waves*. John Wiley and Sons, New York, 1974.
- [91] G. B. Wright and B. Fornberg. Scattered node compact finite difference-type formulas generated from radial basis functions. *J. Comput. Phys.*, 212(1):99–123, 2006.
- [92] Jianke Yang. *Nonlinear waves in integrable and nonintegrable systems*. SIAM, Philadelphia, 2010.
- [93] Guo Ben Yu. *Spectral methods and their applications*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1998.
- [94] Keqian Zhang and Dejie Li. *Electromagnetic Theory for Microwave and Optoelectronics*. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [95] Xing Zhou and Hong Siang Tan. Monte Carlo formulation of field-dependent mobility for Al_xGa_{1-x}As. *Solid State Electronics*, 38(6):1264–1266, 1995.